



Dynamique d'ions en pièges radio-fréquences

Mathieu Marciante

► To cite this version:

Mathieu Marciante. Dynamique d'ions en pièges radio-fréquences. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2011. Français. NNT : . tel-00641606

HAL Id: tel-00641606

<https://theses.hal.science/tel-00641606>

Submitted on 16 Nov 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse

Présentée en vue de l'obtention du grade de
Docteur de l'Université de Provence

Dynamique d'ions en pièges radio-fréquences

par

Mathieu Marciante

Soutenue le 16 juin 2011 devant le jury composé de

Annette Calisti (PIIM, Marseille)
Michael Drewsen (IFA, Aarhus, Danemark)
Yves Elskens (PIIM, Marseille)
David Guéry-Odelin (LCAR, Toulouse)
Paul Indelicato (LKB, Paris)
Martina Knoop (PIIM, Marseille)

Directrice de thèse
Rapporteur
Examineur
Rapporteur
Examineur
Directrice de thèse

Remerciements

La thèse présentée dans ce manuscrit s’est déroulée au laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires - PIIM - situé à Marseille. Durant les quatre années de cette thèse, laquelle est née d’une collaboration entre les équipes Confinement d’Ions et Manipulation Laser (CIML) et Diagnostics dans les Gaz et les Plasmas (DGP), j’ai eu la chance d’être dirigé par un trio de chercheuses dont la gentillesse, les compétences et la disponibilité, m’ont permis de m’épanouir pleinement dans le domaine de la recherche fondamentale.

J’aimerais tout d’abord remercier Caroline Champenois (CIML) qui, bien que ne faisant pas officiellement partie de mes directrices de thèse, a tenu un rôle de tout premier plan dans mon apprentissage de la recherche. Les derniers mois de cette thèse ont été l’occasion d’observer les balbutiements de sa manip, et je lui souhaite de beaux et nombreux résultats dans le monde passionnant, et encore largement inexploré, des multipôles d’ordres supérieurs.

Je souhaite remercier énormément mes deux directrices de thèse, Annette Calisti (DGP) et Martina Knoop (CIML), dont les tempéraments très différents m’ont permis de toujours trouver les réponses et les conseils dont j’ai eu besoin, aussi bien que les “coups-de-pieds-au-cul” quelquefois nécessaires au bon déroulement d’une thèse.

Ces quelques lignes sont bien peu pour témoigner à ces drôles de dames de ma gratitude, pour tout ce qu’elles m’ont apporté durant ces quatre années, tant sur le plan professionnel que par leurs qualités humaines.

Je souhaite ensuite remercier l’ensemble des membres de l’équipe CIML pour les explications et éclairages qu’ils ont pu m’apporter au cours de ces années, notamment concernant l’aspect expérimental du sujet, et plus généralement pour la bonne humeur qui caractérise cette équipe et dont j’ai pu profiter : Didier Guyomarc’h, Gaëtan Hagel, Marie Houssin, Hulya Kirmaci, Olivier Morizot, Fernande et Michel Vedel, et en particulier Jofre Pedregosa-Gutierrez avec qui j’ai eu le plaisir de travailler de façon plus rapprochée, et de participer au montage de la manip du multipôle aux cotés de Vincent Long que je remercie également.

Je souhaite aussi remercier l’ensemble des membres de l’équipe DGP : Yannick Marandet, Laurence Mouret, Joël Rosato, Roland Stamm, et, ayant pris mes quartiers “coté DGP”, je souhaite remercier plus particulièrement les personnes de cette équipe qui m’ont entouré de près pendant ces quatre années et avec qui j’ai pris plaisir à partager le quotidien : Sandrine Ferri, Françoise Gosse, Mohamed Koubiti, Marie-Annick Lemarchal, Caroline Mossé et Bernard Talin. J’aimerais remercier en particulier Sandrine Ferri pour son investissement pendant mon ATER, me permettant de terminer ma thèse dans de bonnes conditions. Je souhaite aussi remercier Abdesamad Mekkaoui, doctorant de l’équipe DGP, avec qui il a été très plaisant de partager le bureau pendant ces années de thèse.

Je remercie également Paul Génésio pour l'aide qu'il m'a apporté concernant la parallélisation MPI du code de dynamique moléculaire, ainsi que pour ses explications sur les divers aspects du numérique en général.

J'aimerai aussi remercier des personnes rencontrées dans le cadre de l'ATER aux cotés desquelles il a été très agréable d'effectuer des enseignements : Jérôme Borghino, Cédric Pardanaud et Laure Siozade.

Je souhaite également remercier l'ensemble des membres de mon jury de thèse d'avoir accepté d'évaluer mon travail : Prof. Michael Drewsen (IFA), Prof. Yves Elskens (PIIM), Prof. David Guéry-Odelin (LCAR) et Prof. Paul Indelicato (LKB). Je remercie en particulier Michael Drewsen et David Guéry-Odelin d'avoir accepté de rapporter sur mon manuscrit de thèse, ainsi que Yves Elskens, pour ses nombreuses corrections et commentaires avisés.

Puisque le temps de cette thèse représente aussi nos premières années de vie commune, je veux remercier Natalia, femelle de mon espèce qui a accepté de se baguer avec moi, pour tout ce que nous partageons au quotidien.

Finalement j'aimerai remercier mes parents, non pas pour l'immensité des choses que je leur dois, mais ici, pour m'avoir permis d'effectuer un cursus universitaire sans avoir jamais eu à me préoccuper d'autre choses que de mes études, et de m'avoir ainsi aidé à en arriver là.

Table des matières

Introduction	1
1 Les pièges radio-fréquences	7
1.1 Pièges radio-fréquences quadrupolaires	7
1.1.1 Géométries 3D et linéaires	7
1.1.2 Quadrupôles et équations de Mathieu	8
1.2 Pseudo-potentiel et approximation adiabatique	12
1.3 Multipôles d'ordres supérieurs	16
2 Le programme ITraPS	23
2.1 Le programme dans son ensemble	23
2.2 Prise en compte des forces	27
2.2.1 Les forces en présence	27
2.2.2 Algorithmes de calcul des forces	30
2.3 Modélisation du refroidissement Doppler	37
2.3.1 Le refroidissement Doppler	37
2.3.2 Calcul des populations	38
2.3.3 Implémentation de l'interaction	42
2.3.4 Validation de la modélisation	45
2.4 Mesure de la température	50
2.4.1 Température en piège radio-fréquence	50
2.4.2 Remarques sur l'implémentation	53
3 Refroidissement Doppler par un unique laser	55
3.1 Introduction	55
3.2 Réalisation de l'étude	58
3.2.1 Les paramètres de piégeage	58
3.2.2 Les paramètres d'interaction laser	60
3.2.3 Réalisation d'une statistique	60
3.3 Résultats en pseudo-potentiel	61
3.3.1 Potentiel radial isotrope	61
3.3.2 Potentiel radial anisotrope	64
3.4 Résultats en potentiel radio-fréquence	67
3.4.1 Potentiel radial isotrope	67
3.4.2 Potentiel radial anisotrope	68
3.5 Conclusions	72

4	Organisation d'un petit nombre d'ions dans un $2k$-pôle linéaire	73
4.1	Introduction	73
4.2	Equilibre d'un anneau d'ions dans un $2k$ -pôle	75
4.2.1	Obtention d'un anneau plan	75
4.2.2	Le minimum du pseudo-potentiel comme rayon d'équilibre	79
4.3	Aspect dynamique du confinement	82
4.3.1	Influence de la structure d'équilibre sur le refroidissement	82
4.3.2	Adiabaticité d'un anneau d'ions en régime de Lamb-Dicke	88
4.3.3	Un anneau d'ions sans refroidissement laser	91
4.4	Conclusions	94
5	Des lignes d'ions en multipôles linéaires	95
5.1	Introduction	95
5.2	Un exemple de principe	96
5.3	Le cas général	102
5.4	Potentiel généré par un piège réaliste	104
5.5	Conclusions	107
	Perspectives	109
	Bibliographie	113

Introduction

Les pièges radio-fréquences, associés aux techniques de refroidissement laser, permettent l'étude et le contrôle de la matière à l'échelle atomique. Dans ce type de pièges, placés en enceinte ultra-vide, des particules ionisées (atomes ou molécules) évoluent sous l'action d'un champ électrique oscillant qui leur impose un mouvement forcé. Sous certaines conditions de fonctionnement, ce mouvement forcé résulte en un confinement des particules, pouvant être décrit par un potentiel effectif statique. Le mouvement des particules peut alors être décomposé en deux mouvements périodiques. Un mouvement de faible fréquence et de grande amplitude, décrivant la dynamique de l'ion dans le potentiel effectif statique, sur lequel se superpose le mouvement forcé, de faible amplitude, oscillant en phase avec le champ électrique du piège. Ce dispositif permet alors de piéger de la particule unique à plusieurs milliers.

L'apparition du premier piège radio-fréquence (rf) date de l'année 1953, lors de laquelle W. Paul inventa le piège qui porte désormais son nom, et qui lui valut le prix Nobel en 1989 [1]. Inspiré de la technologie des filtres de masse, le piège de Paul utilise un ensemble d'électrodes générant des champs électriques rf, dont les propriétés de symétrie spatiale sont celles d'un champ quadrupolaire. Le champ rf, alors réparti sur l'ensemble des directions de l'espace, induit un confinement des particules chargées par un potentiel effectif de type harmonique. En 1989, J.D. Prestage *et al.* [2] proposèrent d'utiliser à des fins métrologiques un piège de géométrie alternative, dite linéaire, dans lequel le champ rf est uniquement réparti sur deux directions de l'espace, l'emploi d'un champ statique permettant le confinement dans la troisième direction. Ce type de piège offre l'avantage majeur de disposer d'une direction selon laquelle les ions sont dispensés du mouvement forcé induit par le champ rf.

Depuis la réalisation du confinement des particules, le développement de techniques de refroidissement des espèces piégées a été un enjeu de tout premier plan. La première technique à avoir été utilisée est celle du gaz tampon. Un gaz neutre inerte, de basse température, est alors introduit dans l'enceinte à vide. Par suite des collisions avec l'espèce ionique piégée, qui permettent une redistribution de l'énergie cinétique, une diminution de la température des ions est observée. Cette technique permet l'obtention de températures de l'ordre de la dizaine de kelvins. En refroidissant, les ions évoluent préférentiellement près du centre du piège, où le mouvement forcé induit par le champ rf, qui ne peut être refroidi, est plus faible.

Le refroidissement a connu une amélioration sans précédent avec l'arrivée de la technologie laser, qui a engendré diverses techniques de refroidissement. Parmi celles-ci, le refroidissement Doppler [3–6] met à profit l'effet mécanique du rayonnement électromagnétique sur les espèces atomiques, et permet d'atteindre des températures de l'ordre du dixième de millikelvin. Ces températures donnent accès à des propriétés particulières de la matière, comme la formation de structures ioniques appelées cristaux de Coulomb [7–11], pouvant comporter de deux ions à plusieurs milliers d'ions dans un piège rf linéaire. Dans de telles structures, la position moyenne des ions est fixe, mais chaque ion décrit un mouvement d'oscillation forcé, dont l'amplitude et la direction dépendent du champ rf local.

Lorsque le nombre d'ions est suffisamment faible, le refroidissement Doppler permet de faire converger les ions au centre du piège, sur les sites où le champ rf est théoriquement nul. Le piège de Paul dispose d'un unique point central où le champ rf s'annule, au contraire des pièges rf linéaires, qui disposent d'un axe entier selon lequel le champ rf est nul, remplacé par un champ électrique statique. En ces lieux, caractérisés par l'absence de mouvement forcé, l'amplitude du mouvement de l'ion est limitée par son mouvement thermique. Aux températures accessibles par refroidissement Doppler, un potentiel de confinement adapté donne accès à un régime particulier du mouvement des ions : le régime de Lamb-Dicke. Ce régime est caractérisé par une faible amplitude du mouvement de l'atome par rapport à la longueur d'onde du rayonnement avec lequel il est en interaction. L'obtention de ce régime permet la réalisation de mesures de spectroscopie de très grandes précisions, et permet d'obtenir un contrôle de certaines propriétés quantiques de la matière.

Les possibilités offertes par ces technologies sont nombreuses, et sont exploitées dans des domaines très variés de recherche fondamentale. Citons par exemple les applications à la métrologie des fréquences [12–15], dont l'enjeu est la réalisation d'un étalon de fréquence basé sur une transition optique d'un ion unique, soit sur une transition micro-onde dans un nuage d'ions. Citons encore les applications à la chimie froide [16, 17], qui permettent l'étude de la chimie se déroulant en milieu interstellaire notamment. Les applications à l'information quantique [18–20] sont aussi nombreuses et en nombre croissant. Dans celles-ci, les états quantiques des espèces piégées sont utilisés à titre de quantum-bits. Dans le domaine des simulations quantiques [21, 22], ce sont les propriétés physiques d'un système particulier qui sont utilisées pour simuler un tout autre système, issu le plus souvent de la matière condensée. Les domaines cités précédemment ne constituent pas une liste exhaustive des domaines d'applications des ions en pièges radio-fréquences, mais nul n'est besoin de motiver plus encore l'existence de ces pièges et leur développement.

Ces ensembles d'ions piégés tenant un rôle de premier plan dans de nombreux domaines de recherche fondamentale, comme appliquée, il est essentiel de comprendre et caractériser au mieux la dynamique des ions au sein des pièges. Cette dynamique, classique, est extrêmement complexe et met en jeu divers phénomènes physiques tels que les excitations paramétriques, les interactions à longue portée, les effets de taille finie, des problématiques de systèmes ouverts et plus généralement des phénomènes relevant de la dynamique non-linéaire et de la thermodynamique hors équilibre. Les moyens de diagnostics de l'état de ces systèmes lors d'études expérimentales restent des moyens indirects (élargissement Doppler des spectres de fluorescence pour estimer la température, intégration temporelle de la fluorescence par des caméras CCD pour déterminer les positions moyennes des ions dans les structures, etc...) et s'avèrent souvent trop limités pour permettre une description suffisamment précise de l'état du système.

De même, et comme cela est la règle en physique, la diversité des phénomènes en jeu rendent les approches analytiques limitées à l'étude de cas simples (un ion unique évoluant dans un potentiel rf idéal, emploi d'un modèle statique pour décrire le confinement), ou du moins simplifiés et conduisent inexorablement à une perte d'information sur le système réel.

Une approche intéressante est alors l'utilisation de simulations numériques. Ce type d'approche permet la prise en compte simultanée d'un grand nombre de phénomènes physiques présents dans ces systèmes, et offre la possibilité de dissocier, de façon ad hoc mais productive, les différents phénomènes pour en analyser les effets indépendamment. Cependant, une approche numérique nécessite l'établissement de modèles pour la description des phénomènes

et possède donc un domaine de validité. De même, l’aspect numérique lui-même impose une précision limitée aux résultats des simulations (erreurs d’arrondis, epsilon machine, précision de l’algorithme d’intégration, etc...). L’approche numérique ne constitue donc pas une panacée mais peut s’avérer extrêmement féconde dans la description du système simulé et offre un appui supplémentaire dans la caractérisation des systèmes expérimentaux, lorsque les paramètres de la simulation sont choisis en accord avec ceux de l’expérience.

Les travaux présentés dans ce manuscrit sont le fruit d’une interaction entre deux domaines très différents de la physique. D’un côté, le piégeage et le refroidissement des ensembles d’ions en piège rf, spécialité de l’équipe CIML et sujet dont traite le présent manuscrit, et de l’autre, la modélisation des plasmas denses et de faibles températures, dont l’expertise est détenue par l’équipe DGP qui a apporté ses connaissances et savoir-faire en simulation numérique.

La motivation originale de ce travail était de développer un programme numérique permettant d’accompagner et d’interpréter les résultats expérimentaux d’une expérience nouvelle, impliquant un très grand nombre de particules piégées et ayant pour but premier de s’intéresser aux aspects dynamiques et thermodynamiques de ces très grands ensembles d’ions. De surcroît, cette expérience met en jeu un piège “multiple” possédant trois lieux de confinement distincts, dont deux de géométrie quadrupolaire, et un de géométrie octupolaire. Au-delà des possibilités novatrices qu’offrent les pièges multipolaires d’ordres supérieurs (ici l’octupôle) et qui n’ont, pour l’heure, fait l’objet que de peu d’études expérimentales concernant les propriétés du refroidissement des ions et des cristaux de Coulomb, ce piège multiple va permettre l’étude du transport des ions inter-pièges et notamment entre piège de différentes géométries, cette dernière problématique n’ayant jamais été soulevée, ne serait-ce que théoriquement.

Les nombreux objectifs de ces futures expériences trouvent leurs motivations dans les questions que soulève la recherche fondamentale, qu’elles soient liées aux propriétés thermodynamiques des ensembles d’ions, ou à des domaines dont l’application peut être plus directe, comme les différents protocoles liés à l’information quantique ou à la métrologie des fréquences.

Ainsi, c’est dans l’optique d’un lien direct avec les expériences qu’a été réalisé le programme numérique, justifiant, dans la plupart des cas, les espèces d’ions choisis pour les simulations ainsi que les paramètres de piégeage et de refroidissement.

La thèse présentée dans ce manuscrit explore quelques aspects de la dynamique des ions confinés en piège radio-fréquences, ainsi que leur refroidissement par laser Doppler. Les études sont effectuées au moyen de simulations numériques utilisant la technique de la dynamique moléculaire. Les études numériques des systèmes d’ions confinés en pièges radio-fréquence ont précédemment permis de prédire la forme des structures obtenues à basses températures [11, 23–26]. Ces simulations sont aussi employées de façon complémentaire aux études expérimentales. Elles permettent alors d’appréhender la dynamique des ions lors d’une expérience particulière (détermination du taux de chauffage d’un cristal lors de l’application d’un potentiel additionnel par exemple), mais peuvent aussi être utilisés comme un outil de diagnostic (l’accord entre l’image CCD d’un cristal et son analogue simulé permet de fournir une évaluation relativement précise du nombre d’ions constituant le cristal). Ce type de simulations a aussi permis d’étudier les effets de la dynamique non-linéaire prenant place dans les pièges rf [27, 28], ainsi que différents types de refroidissement des ions [28, 29].

Une part importante des travaux présentés dans cette thèse concerne les systèmes multi-particules. Pour ces systèmes, nous mettons en avant les propriétés induites par l’interaction coulombienne, et notamment les propriétés thermiques des structures obtenues à basses températures.

Ce manuscrit se compose de trois parties. La première partie (chapitre 1) regroupe le matériel nécessaire pour aborder la dynamique d’ions confinés en piège radio-fréquence. Il présente tout d’abord le confinement en piège quadrupolaire, pour lequel la dynamique répond aux équations de Mathieu. Il introduit ensuite l’approche du pseudo-potentiel, qui permet d’approximer le confinement des ions par un potentiel effectif statique. Cette première partie finit en présentant le confinement en pièges multipolaires d’ordres supérieurs à l’ordre quadrupolaire, et insiste sur les différences fondamentales (et nombreuses) qui existent par rapport au cas historique du quadrupôle.

La deuxième partie (chapitre 2) aborde l’aspect numérique de ma thèse. Elle présente de façon succincte la technique de la dynamique moléculaire, et explicite l’algorithme utilisé pour l’intégration des équations de la dynamique. Les forces présentes lors du confinement des ions sont ensuite passées en revue, de façon à discriminer celles dont les effets sont prédominants sur la dynamique (dynamique est ici entendue au sens classique, et ne concerne pas la dynamique interne des ions). L’écriture des algorithmes modélisant les forces pertinentes est détaillée, notamment dans le cadre de la parallélisation du calcul. Après un bref rappel de la théorie de l’interaction laser-atome, une modélisation du refroidissement Doppler est présentée ainsi que son implémentation dans le programme. La température constituant un outil de diagnostic majeur pour décrire l’état d’un ensemble d’ions, cette partie se termine par une section qui lui est consacrée et qui explique la façon dont elle est calculée dans le programme.

La troisième partie (chapitres 3, 4 et 5) présente les principaux résultats obtenus durant ma thèse. Le chapitre 3 concerne le refroidissement Doppler d’un ensemble d’ions en piège quadrupolaire par un unique laser, qui est une situation expérimentale courante. Le refroidissement d’un tel système s’effectue par l’intermédiaire de l’interaction coulombienne qui couple les différents degrés de liberté des ions à la direction du faisceau laser. Nous montrons qu’un refroidissement effectif n’est possible que dans certaines configurations de confinement, pour lesquelles l’interaction coulombienne permet un couplage efficace des directions du mouvement des ions. Nous mettons aussi en évidence le statut particulier du centre de masse, dont la dynamique n’est pas soumise à l’interaction coulombienne.

Le chapitre 4 présente une étude des structures à faibles nombres d’ions, obtenues à basses températures dans les multipôles linéaires d’ordres supérieurs à 2. Celle-ci est conduite par le fil directeur d’une éventuelle application à la métrologie des fréquences optiques. Une étude analytique, menée dans l’approche du pseudo-potentiel, permet principalement d’obtenir une contrainte sur les conditions d’équilibre des structures. L’utilisation des simulations de dynamique moléculaire donne ensuite accès à la dynamique dans le potentiel rf idéal d’un octupôle linéaire. Ceci permet de mettre en évidence les propriétés particulières des structures d’ions en anneau plan (permises par les multipôles linéaires d’ordres supérieurs au quadrupôle), du fait du découplage de la direction longitudinale du mouvement des ions, des directions soumises au forçage rf. Nous mettons en évidence des conditions de fonctionnement des pièges, pour lesquelles les structures d’ions obtenues ne peuvent être décrites par l’approche du pseudo-potentiel.

Le dernier chapitre présente la possibilité de créer des noeuds supplémentaires dans le champ radio-fréquence des multipôles linéaires d'ordres supérieurs au quadrupôle. Cela est possible par la superposition d'un champ électrique rf d'ordre inférieur au champ confinant. Ces noeuds engendrent des minimums supplémentaires dans le potentiel effectif de confinement, pour lesquels l'excitation paramétrique rf s'annule. Des ions sont alors susceptibles d'être confinés dans ces minimums puis d'y être refroidis jusqu'à la température limite Doppler.

Chapitre 1

Les pièges radio-fréquences

L'objectif de ce chapitre est d'introduire les éléments essentiels pour appréhender la dynamique des ions en pièges radio-fréquences. Après avoir justifié l'utilisation d'un potentiel électrique radio-fréquence pour le confinement des particules chargées, nous présentons la spécificité de la dynamique en quadrupôle à travers les équations de la dynamique : les équations de Mathieu. Nous détaillons ensuite l'obtention du pseudo-potentiel, potentiel fictif permettant une compréhension alternative aux équations de Mathieu du phénomène de confinement. Ce pseudo-potentiel permet, dans une dernière partie, de décrire le confinement par des multipôles d'ordres supérieurs au quadrupôle, pour lesquels aucune solution analytique des équations de la dynamique n'est connue.

1.1 Pièges radio-fréquences quadrupolaires

1.1.1 Géométries 3D et linéaires

La forme la plus générale d'un potentiel rf quadrupolaire idéal est la suivante :

$$\Phi_{4\text{rf}}(x, y, z, t) = \frac{V_4(t)}{r_0^2} (\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2) \quad (1.1)$$

où $V_4(t)$ est le potentiel radio-fréquence, r_0 est une dimension caractéristique du piège, et α , β et γ sont des constantes adimensionnées. Ce potentiel, en l'absence de charges confinées à l'intérieur du piège, doit obéir à l'équation de Laplace $\Delta\Phi_{4\text{rf}} = 0$, ou encore :

$$\alpha + \beta + \gamma = 0 \quad (1.2)$$

Cette équation traduit l'impossibilité de confiner, au moyen de champs électriques statiques, des particules chargées dans les trois directions de l'espace simultanément. En effet, au moins une des constantes devant être négative pour satisfaire l'équation (1.2), à une direction au minimum correspond un potentiel déconfinant. Le principe de fonctionnement du piège rf est basé sur l'utilisation d'un potentiel électrique $V_4(t)$ changeant de signe périodiquement dans le temps. Ainsi, les directions selon lesquelles le potentiel est déconfinant à un instant donné deviennent les directions confinantes la demi-période suivante, et inversement. Pour une fréquence d'oscillation et une amplitude de potentiel adaptées, l'effet moyen se traduit par le confinement des particules.

Lorsque chaque constante est non nulle, la géométrie du piège est dite 3D car le champ radio-fréquence est réparti sur les trois directions de l'espace. Le potentiel du piège de Paul est celui

pour lequel on choisit $\alpha = \beta = 1$ et $\gamma = -2$. Cependant, une seconde géométrie alternative existe. Elle consiste à supprimer le champ radio-fréquence sur l'une des directions de l'espace. Nous choisissons de façon traditionnelle de supprimer le champ rf selon la direction z , c'est à dire imposons $\gamma = 0$. Satisfaire à l'équation de Laplace se résume donc à la contrainte $\alpha = -\beta$. Ce type de géométrie est dite linéaire [2]. Le champ radio-fréquence est alors généré par un dispositif schématisé sur la figure 1.1. Dans l'idéal, la forme des barreaux générant le champ rf quadrupolaire doit épouser la forme des équipotentielles. Lorsque les électrodes réelles dévient de la géométrie idéale, le champ généré contient des termes d'ordres supérieurs perturbant la dynamique. Cependant, beaucoup de pièges utilisent des barreaux cylindriques pour générer le champ de confinement, et un rapport particulier entre le diamètre des barreaux et le rayon intérieur du piège permet une annulation des perturbations au premier ordre [30]. De même, les barreaux ont une longueur finie et l'obtention d'un champ purement radial est réaliste suffisamment loin des bords du piège. Dans cette géométrie, le confinement axial est réalisé au moyen d'un potentiel statique U_{st} , devant lui aussi répondre à l'équation de Laplace :

$$U_{st}(x, y, z) = \frac{U_{dc}}{z_0^2} \left(z^2 - \frac{x^2 + y^2}{2} \right) \quad (1.3)$$

où U_{dc} est le potentiel appliqué sur les électrodes et z_0 la demi-longueur intérieure du piège selon la direction z . De même, cette équation décrivant un potentiel harmonique parfait n'est valable que suffisamment loin des électrodes d'un piège réel.

Il est aussi possible de superposer sur les électrodes générant le champ rf, un potentiel statique optionnel Φ_{4st} . Ainsi, ce potentiel statique possède la même géométrie que le potentiel rf ($\sim r^2 \cos(2\phi)$ lorsqu'on prend la convention $\alpha = 1$). Le potentiel électrique total du piège quadrupolaire linéaire, Φ_{4l} , est finalement la somme des potentiels rf et statiques :

$$\Phi_{4l}(x, y, z, t) = \Phi_{4rf}(x, y, t) + \Phi_{4st}(x, y) + U_{st}(x, y, z) \quad (1.4)$$

Ce type de géométrie possède deux avantages majeurs. Le premier est de disposer d'un lieu étendu, l'axe de symétrie du piège, selon lequel l'ion ne subit pas le mouvement forcé imposé par le champ électrique rf. Cela permet des applications à la métrologie ou à l'information quantique entre autres, pour lesquelles les ions doivent être protégés le plus possible des perturbations. Un deuxième avantage est de pouvoir créer des pièges disposant d'une zone de confinement aussi grande que souhaitée, dans laquelle le champ rf reste négligeable. Il suffit pour cela de choisir à dessein la dimension z_0 , le piège étant invariant selon cet axe. Cela permet d'atteindre de très grands nombres d'ions piégés.

1.1.2 Quadrupôles et équations de Mathieu

Le traitement de la dynamique, dans le cas quadrupolaire, est sensiblement le même dans les géométries 3D et linéaires. Dans un souci de concision et de simplicité, nous le traitons donc dans le cas linéaire, le cas 3D pouvant se trouver dans [31–33], références dont est très largement inspirée cette section.

Le potentiel électrique quadrupolaire Φ_{4l} généré par un quadrupôle linéaire s'écrit en coordonnées cylindriques (voir figure 1.1) :

$$\Phi_{4l}(r, \phi, t) = \Phi_{4st}(r, \phi) + \Phi_{4rf}(r, \phi, t) \quad (1.5)$$

$$= [V_{4st} - V_4 \cos(\Omega t)] \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \cos(2\phi) \quad (1.6)$$

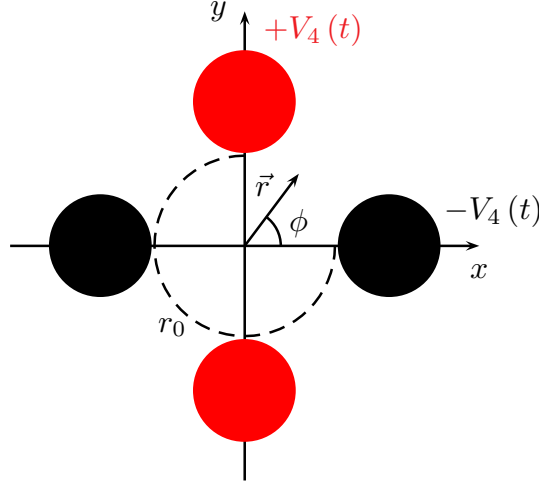


Figure 1.1 – Schéma des électrodes d'un piège quadrupolaire linéaire dans le plan radial.

où V_{4st} et V_4 sont respectivement le potentiel statique et l'amplitude maximale du potentiel rf, appliqués sur les électrodes générant la contribution quadrupolaire, Ω est la pulsation radio-fréquence et r_0 le rayon intérieur du piège. Exprimé en coordonnées cartésiennes, Φ_{4l} conserve une forme particulièrement simple :

$$\Phi_{4l}(x, y, t) = [V_{4st} - V_4 \cos(\Omega t)] (x^2 - y^2) / r_0^2 \quad (1.7)$$

Lorsqu'une unique particule chargée, de charge q_e et de masse m , considérée ponctuelle est soumise à ce potentiel électrique, elle subit une force $\vec{F} = -q_e \vec{\nabla} \Phi_{4l}$. Utilisant la seconde loi de Newton $\vec{F} = m\vec{a}$, on obtient un système d'équations différentielles du second ordre :

$$\begin{cases} \ddot{x} + 2 q_e [V_{4st} - V_4 \cos(\Omega t)] x / (m r_0^2) = 0 \\ \ddot{y} - 2 q_e [V_{4st} - V_4 \cos(\Omega t)] y / (m r_0^2) = 0 \end{cases} \quad (1.8)$$

Définissant de nouveaux paramètres adimensionnés (a_x, q_x) et (a_y, q_y) pour chaque composante, et un temps réduit τ tels que :

$$\tau = \Omega t / 2 \quad (1.9)$$

$$q_x = -q_y = 4 q_e V_4 / (m r_0^2 \Omega^2) \quad (1.10)$$

$$a_x = -a_y = 8 q_e V_{4st} / (m r_0^2 \Omega^2) \quad (1.11)$$

le système d'équations différentielles régissant le mouvement de la particule s'écrit à présent :

$$\begin{cases} \frac{d^2 x}{d\tau^2} + (a_x - 2 q_x \cos(2\tau)) x = 0 \\ \frac{d^2 y}{d\tau^2} + (a_y - 2 q_y \cos(2\tau)) y = 0 \end{cases} \quad (1.12)$$

Chacune des équations composant ce système est une équation de Mathieu [31, 32, 34, 35]. La résolution générale des équations de Mathieu est complexe, et dépasse de très loin le cadre de cette introduction. Nous nous bornerons à donner les résultats essentiels en ce qui concerne

notre approche des pièges rf. La stabilité d'une solution $u(\tau)$ (ici $u \in \{x, y\}$), c'est à dire pour laquelle $u(\tau)$ ne diverge pas lorsque τ tend vers l'infini, est fonction des paramètres a_u et q_u . Le domaine d'existence des solutions stables est donné par le domaine de l'espace des paramètres a_u et q_u , présenté en figure 1.2a. Les régions fermées dans le plan (q_u, a_u) délimitent les zones de stabilité des solutions. Confiner physiquement une particule revient à rechercher l'intersection

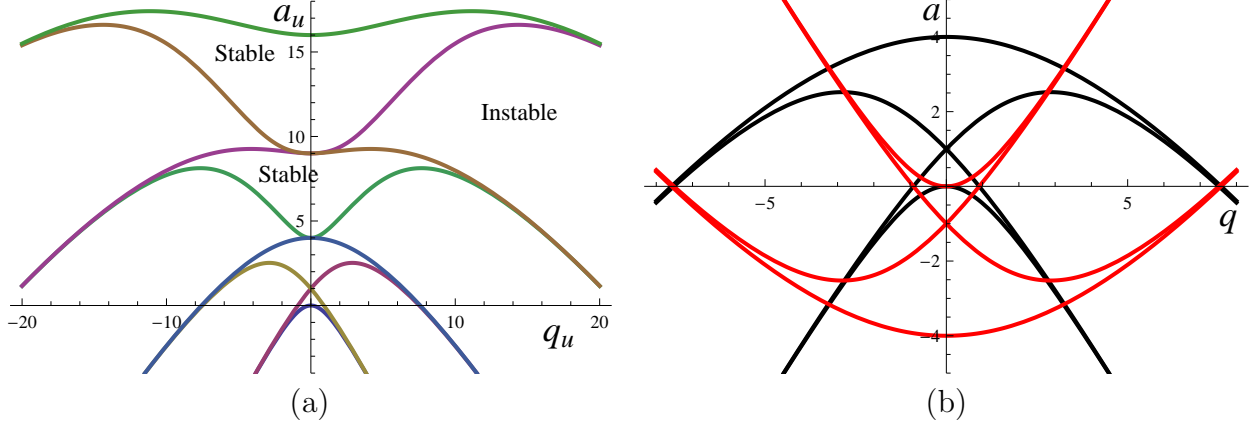


Figure 1.2 – (a) Les quatre premiers domaines de stabilité des solutions de l'équation de Mathieu dans le plan des paramètres a et q . (b) Recouvrement des domaines de stabilité des solutions x (noir) et y (rouge).

des domaines de stabilité des solutions pour x et y . Pour ce faire, nous superposons ces domaines dans le même plan (q, a) en figure 1.2b où, utilisant les équations (1.10) et (1.11), nous avons :

$$q_x = -q_y = q \quad (1.13)$$

$$a_x = -a_y = a \quad (1.14)$$

Un point dans cet espace des paramètres caractérise un point de fonctionnement particulier du piège rf, lorsque l'on considère le confinement d'une espèce ionique de masse m et de charge q_e donnée (c'est le principe de fonctionnement des filtres de masse, qui discriminent sur le rapport q_e/m des particules). Nous choisissons arbitrairement de travailler avec un potentiel V_4 positif, le potentiel statique V_{4st} pouvant être choisi positif ou négatif. Les domaines de stabilité de la figure 1.2b sont symétriques selon les axes a et q , impliquant que la stabilité des solutions est indépendante du signe de la charge de l'ion. Nous choisissons de travailler avec des ions de charges positives. Le domaine des paramètres (q, a) correspondant à une situation physique se réduit au demi-plan $q > 0$. Dans ce demi-plan, plusieurs zones de recouvrement des solutions stables existent. Dans la pratique, seule la zone la plus proche de l'origine, représentée en figure 1.3, est choisie comme domaine de fonctionnement des pièges. C'est celle qui correspond aux valeurs de q les plus faibles possibles et donc au forçage radio-fréquence le plus faible. Les solutions $u(\tau)$ stables, dont deux sont représentées en figure 1.4, prennent la forme ([31, 32, 34, 35]) :

$$u(\tau) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} (C_u)_{2n} \cos((2n \pm \beta_u)\tau) + \alpha' \sum_{n=-\infty}^{\infty} (C_u)_{2n} \sin((2n \pm \beta_u)\tau) \quad (1.15)$$

où α et α' sont des constantes d'intégration réelles dépendant des conditions initiales, et β_u ainsi que $(C_u)_{2n}$ sont des constantes réelles dépendant des paramètres a_u et q_u . Les constantes $(C_u)_{2n}$ satisfont en outre à une relation récursive dépendant du paramètre β_u . La solution stable $u(t)$

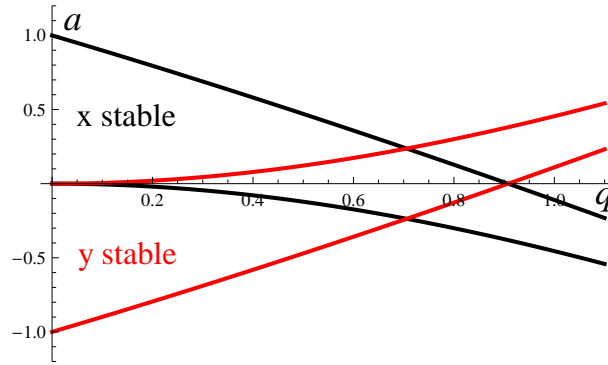


Figure 1.3 – *Domaine de stabilité habituellement choisi comme zone de fonctionnement des pièges radio-fréquence.*

est donc une somme infinie de termes oscillant à des pulsations $(\omega_u)_n = (2n \pm \beta_u)\Omega/2$, dont la plus faible est :

$$\omega_u = \frac{\beta_u \Omega}{2} \quad (1.16)$$

Cette fréquence, nommée fréquence séculaire du mouvement, est la fréquence caractéristique du confinement de la particule. Elle correspond à la fréquence du mouvement harmonique transparaissant dans la section de Poincaré en figure 1.4b. Cela signifie que, en moyenne sur une période séculaire $2\pi/\omega_u$, l'énergie de la particule est conservée. L'expression de β_u n'a pas de forme analytique simple dans le cas général, cependant lorsque a_u et q_u sont suffisamment petit, une méthode de développement en série permet d'approximer β_u par [36] :

$$\beta_u = \sqrt{\frac{q_u^2}{2} + a_u} \quad (1.17)$$

Nous avons considéré uniquement la dynamique due à la partie quadrupolaire du potentiel, et tout ce qui a été fait jusqu'à présent est transposable de façon immédiate au cas 3D. Cependant, la géométrie linéaire possède une spécificité. Le potentiel statique U_{dc} , permettant le confinement axial, induit un champ ayant une composante déconfinante dans le plan transverse. Ce champ donne lieu à des paramètres de Mathieu effectifs \tilde{a}_u . Cependant, contrairement aux paramètres précédents pour lesquels $a_x = -a_y$, les paramètres \tilde{a}_u sont identiques pour chaque direction car le champ déconfinant est isotrope dans le plan. Cela conduit à des domaines de stabilité différents de ceux présentés en figure 1.2. Cette spécificité a été traitée en détail par M. Drewsen *et al.* dans l'article [37]. En conséquence, la zone de fonctionnement de la figure 1.3 se voit modifiée et peut être théoriquement étendue vers des q arbitrairement grands.

Ce qui vient d'être décrit concerne le cas d'une unique particule confinée dans un piège rf. Lorsque plusieurs particules sont confinées simultanément, les équations (1.8) sont couplées par l'interaction coulombienne. Le système ne peut alors se réduire aux équations de Mathieu (seul le centre de masse obéit aux équations de Mathieu, à la condition que toutes les particules en interaction aient un rapport charge sur masse q_e/m identiques). L'excitation paramétrique du champ rf induit un apport d'énergie aux particules, par l'intermédiaire du couplage coulombien. Il en résulte un phénomène de chauffage radio-fréquence. Cela se traduit par l'existence d'instabilités supplémentaires, qui ont été étudiées de façon numérique et expérimentale à faible nombre de particules par R. Blümel *et al.* dans [27], où l'étude est

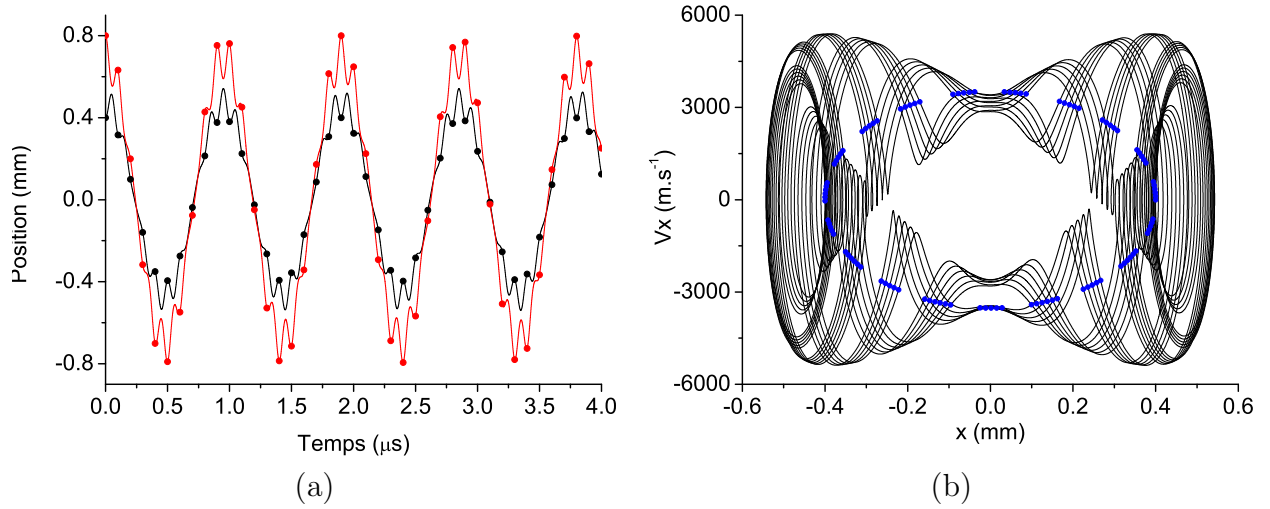


Figure 1.4 – (a) Composantes x (noir) et y (rouge) de la position d’une particule de vitesse initiale nulle, confinée dans le potentiel rf quadrupolaire, pour $a = 0$ et $q = 0,29$. Le rayon intérieur du piège est pris à $r_0 = 2$ mm. Les points sur chaque courbe marquent les instants t multiples de $2\pi/\Omega$.
 (b) Evolution de la composante x du mouvement de la particule piégée dans l’espace (x, v_x) pour une durée supérieure à celle représentée en figure (a). Les points bleus correspondent aux instants t multiples de $2\pi/\Omega$ (section de Poincaré), et forment une ellipse caractéristique d’un mouvement harmonique.

développée dans le cadre des systèmes dynamiques, et numériquement par V.L. Ryjkov *et al.* dans [38] où ils montrent que le chauffage rf est pratiquement inexistant pour des ensembles d’ions à très basses températures, et que son influence augmente de façon exponentielle avec le paramètre q_u des équations de Mathieu. La non-linéarité de la dynamique induit aussi une déformation du diagramme de stabilité (empirique) du piège. L’étude de ces effets a donné lieu au modèle de la charge d’espace [32, 39], dans lequel l’interaction des particules est assimilée à l’interaction de chaque particule avec un champ moyen généré par la densité de charge au sein du piège.

1.2 Pseudo-potentiel et approximation adiabatique

Dans cette section, nous montrons que pour des valeurs des paramètres a_u et q_u suffisamment faibles, tout se passe comme si la particule se trouvait dans un puits de potentiel statique fictif appelé le pseudo-potentiel. La démarche qui mène au pseudo-potentiel, originellement introduite pour les pièges rf par H.G. Dehmelt dans [36] peut se trouver aussi dans [32] ou, traitée de façon plus générale, dans [33]. C’est de cette dernière référence que nous nous inspirons pour rédiger ces lignes.

Considérons une particule chargée, soumise à un champ électrique uniforme $\vec{E} \sin(\Omega t)$, oscillant périodiquement dans le temps. L’évolution temporelle de cette particule est déterminée simplement par l’équation de Newton et ses conditions initiales. Il est intéressant de comparer le mouvement de cette particule, au mouvement que celle-ci aurait en l’absence du champ électrique. Si la particule possède une vitesse \vec{v}_0 et une position \vec{r}_0 au temps $t = 0$ en l’absence de forces extérieures, son mouvement dans le champ électrique radio-fréquence correspond à une

oscillation d'amplitude constante centrée sur la trajectoire de la particule libre $\vec{R}_0(t) = \vec{v}_0 t + \vec{r}_0$:

$$m \ddot{\vec{r}} = q_e \vec{E} \sin(\Omega t) \implies \vec{r}(t) = \vec{R}_0(t) - \vec{\varepsilon} \sin(\Omega t) \quad (1.18)$$

$$\text{avec,} \quad \vec{\varepsilon} = \frac{q_e \vec{E}}{m \Omega^2} \quad (1.19)$$

Remarquons que si nous moyennons la solution précédente sur une période radio-fréquence T_{rf} , la trajectoire obtenue est celle de la particule libre. Considérons maintenant que le champ électrique auquel la particule est soumise ne soit plus uniforme. L'équation d'évolution devient :

$$m \ddot{\vec{r}} = q_e \vec{E}(\vec{r}(t)) \sin(\Omega t) \quad (1.20)$$

Nous inspirant de la solution précédente, nous séparons la trajectoire de la particule en deux échelles de temps. Une première échelle lente, correspondant au mouvement moyenné sur une période radio-fréquence, $\vec{R}(t)$, et une seconde correspondant à la dynamique rapide directement proportionnelle au champ local, $\vec{\varepsilon}(t)$:

$$\vec{r}(t) = \vec{R}(t) - \vec{\varepsilon}(t) \sin(\Omega t) \quad (1.21)$$

L'amplitude de l'oscillation rapide $\vec{\varepsilon}(t)$ dépend maintenant du temps, à travers le mouvement de la particule dans le champ. Par approximations successives, nous remontons à l'accélération de la particule :

$$\dot{\vec{r}}(t) = \dot{\vec{R}}(t) - \dot{\vec{\varepsilon}}(t) \sin(\Omega t) - \Omega \vec{\varepsilon}(t) \cos(\Omega t) \simeq \dot{\vec{R}}(t) - \Omega \vec{\varepsilon}(t) \cos(\Omega t) \quad (1.22)$$

$$\ddot{\vec{r}}(t) = \ddot{\vec{R}}(t) - 2\Omega \dot{\vec{\varepsilon}}(t) \cos(\Omega t) + \Omega^2 \vec{\varepsilon}(t) \sin(\Omega t) \simeq \ddot{\vec{R}}(t) + \Omega^2 \vec{\varepsilon}(t) \sin(\Omega t) \quad (1.23)$$

où les approximations faites sur les dernières égalités utilisent l'hypothèse $\dot{\varepsilon} \ll \Omega \varepsilon$. Si l'amplitude de l'oscillation rapide est petite par rapport à l'amplitude du mouvement lent, $\varepsilon \ll R$, le champ électrique peut être développé au voisinage de la trajectoire lente :

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}(\vec{R}) - (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}_{|\vec{R}} \sin(\Omega t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (1.24)$$

Nous avons donc au premier ordre en ε :

$$m \ddot{\vec{R}}(t) + m \Omega^2 \vec{\varepsilon} \sin(\Omega t) = q_e \vec{E}(\vec{R}(t)) \sin(\Omega t) - q_e (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}_{|\vec{R}(t)} \sin^2(\Omega t) \quad (1.25)$$

Remplaçant $\vec{\varepsilon}$ par son expression dans (1.19), l'égalité se simplifie et on obtient :

$$\ddot{\vec{R}}(t) = -\frac{q_e^2}{m^2 \Omega^2} (\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}_{|\vec{R}(t)} \sin^2(\Omega t) \quad (1.26)$$

Nous utilisons ensuite l'égalité vectorielle :

$$(\vec{E} \cdot \vec{\nabla}) \vec{E}_{|\vec{R}(t)} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} (\|\vec{E}\|^2) - \vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) \quad (1.27)$$

dans laquelle $\vec{\nabla} \times \vec{E}$ est nul au premier ordre (ordre pour lequel la contribution du champ magnétique induit est négligeable). Cela conduit à :

$$\ddot{\vec{R}}(t) = -\frac{q_e^2}{2 m^2 \Omega^2} \vec{\nabla} (\|\vec{E}\|^2) \sin^2(\Omega t) \quad (1.28)$$

Moyennant l'équation précédente sur la période radio-fréquence, nous obtenons la forme du pseudo-potentiel Ψ :

$$\Psi = \frac{q_e^2 \vec{E}^2}{4 m \Omega^2} \quad \text{avec,} \quad \ddot{\vec{R}} = -\vec{\nabla} \Psi / m \quad (1.29)$$

Nous appliquons l'équation précédente au champ radio-fréquence généré par un quadrupôle linéaire :

$$\vec{E}_4(r, \phi) \cos(\Omega t) = \frac{2V_4}{r_0} \left(\frac{r}{r_0} \right) \left(\cos(2\phi) \hat{r} - \sin(2\phi) \hat{\phi} \right) \cos(\Omega t) \quad (1.30)$$

$$\vec{E}_4^2(r) = \frac{4V_4^2}{r_0^2} \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \quad (1.31)$$

Le pseudo-potentiel s'écrit donc :

$$\Psi_4(R) = \frac{q_e^2 V_4^2}{m r_0^2 \Omega^2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \quad (1.32)$$

Le confinement des particules par un quadrupôle est, en première approximation, équivalent à celui d'un potentiel harmonique statique. Un exemple de cette approximation est donné en figure 1.5 sur laquelle sont superposées les composantes de la trajectoire dans le potentiel rf défini par $a_x = 0$ et $q_x \approx 0,07$ et celles obtenues dans le pseudo-potentiel. Sur cette figure, les courbes du mouvement séculaire de chaque composante ne décrivent pas la moyenne du mouvement rf. Cela est dû au fait que la dynamique a été intégrée dans un potentiel rf dont la phase à l'origine des temps correspond au potentiel de l'équation 1.6, c'est à dire $\Phi_{rf} \sim \cos(\Omega t)$ soit une amplitude de champ électrique maximale à $t = 0$. Or, les dynamiques sont intégrées dans chaque potentiel à partir de la même condition initiale qui, avec notre choix de phase initiale du champ rf, ne correspondent pas à la même trajectoire (cela nécessiterait $\Phi_{rf} \sim \sin(\Omega t)$). Nous observons cependant que pour ces valeurs des paramètres de Mathieu, la trajectoire dans le pseudo-potentiel décrit parfaitement le mouvement séculaire de l'ion dans le potentiel rf. Seul le mouvement forcé dû au champ rf, mouvement de faible amplitude et de haute fréquence (le terme $\vec{\varepsilon}(t) \sin(\Omega t)$ de l'approche précédente), permet de différencier les deux trajectoires.

Il est instructif de remarquer que l'expression du pseudo-potentiel correspond à l'énergie cinétique moyenne du micro-mouvement de la particule sur une période rf :

$$\Psi = \frac{1}{2} m \overline{(\Omega \varepsilon \cos(\Omega t))^2} \quad (1.33)$$

Nous pouvons donc considérer, dans cette approche conservative, que le confinement de la particule résulte de l'échange d'énergie cinétique entre le mouvement séculaire et l'énergie cinétique moyenne du micro-mouvement.

Afin d'exprimer le potentiel de confinement total, le principe de superposition du champ électrique dans le vide permet de rajouter les champs statiques satisfaisant à l'équation de Poisson. Nous appellerons, par abus de langage, le potentiel total correspondant Ψ_{4l} , le pseudo-potentiel du quadrupôle linéaire :

$$\Psi_{4l}(R, \phi, z) = \Psi(R) + q_e U_{st}(R, z) + q_e V_{4st} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \cos(2\phi) \quad (1.34)$$

$$= \frac{1}{2} m \omega_r^2(\phi) R^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \quad (1.35)$$

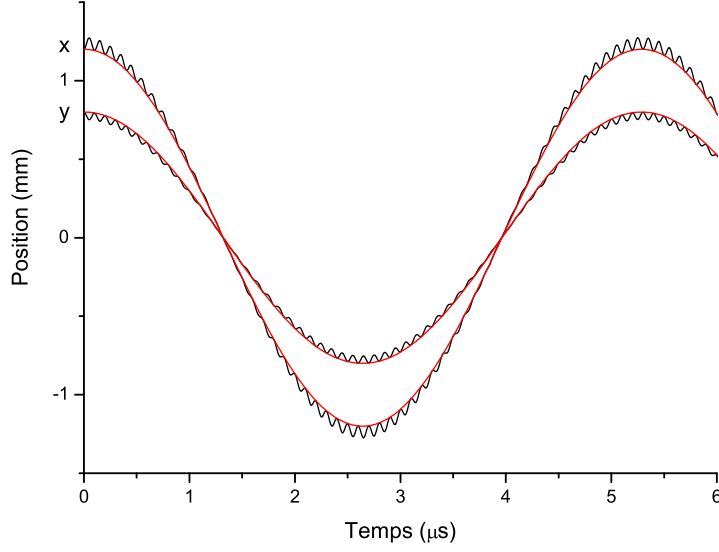


Figure 1.5 – Composantes x et y de la position d'un ion pour les paramètres de Mathieu $a_x = 0$ et $q_x \approx 0,07$ dans le potentiel rf à 10 MHz (noir), et dans le pseudo-potentiel associé (rouge). Les conditions initiales sont $\vec{r}_0 = (1, 2; 0, 8; 0)$ mm et $\vec{v} = 0$ m.s⁻¹.

$$\text{avec} \quad \omega_z = \sqrt{2q_e U_{dc} / (mz_0^2)} \quad (1.36)$$

$$\begin{aligned} \omega_r^2(\phi) &= \frac{2 q_e^2 V_4^2}{m^2 r_0^4 \Omega^2} - \frac{\omega_z^2}{2} + \frac{2 q_e V_{4st}}{m r_0^2} \cos(2\phi) \\ &= \frac{\Omega^2}{4} \left[\frac{q_x^2}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_z}{\Omega} \right)^2 + a_x \cos(2\phi) \right] \end{aligned} \quad (1.37)$$

où q_x et a_x sont les paramètres de Mathieu définis dans les équations (1.10) et (1.11). Lorsque $\omega_z = 0$, nous obtenons respectivement pour $\phi = 0$ et $\phi = \pi/2$, les pulsations ω_x et ω_y du mouvement séculaire décrit par les équations de Mathieu ($\omega_u = \beta_u \Omega/2$). Nous voyons que l'application d'un potentiel quadrupolaire statique ($a_u \neq 0$) induit une asymétrisation du pseudo-potentiel qui, pour $a_x > 0$, augmente la raideur selon x et la diminue selon y , et que l'effet déconfinant du confinement axial ($\propto -\omega_z^2 r^2$) se traduit simplement par une diminution isotrope de la raideur du pseudo-potentiel.

L'approximation du pseudo-potentiel explique de façon simple le confinement des particules, mais ne rend pas compte du forçage radio-fréquence inhérent à ce confinement. En effet, différents potentiels radio-fréquences sont représentés par le même pseudo-potentiel. Pour simplifier, considérons le potentiel radial isotrope, *i.e.* $a_u = 0$, ainsi que le rapport $\omega_z/\Omega \ll 1$, et de ce fait négligeable. Le potentiel radial est alors uniquement dû à la contribution radio-fréquence :

$$\omega_r = \frac{q_x \Omega}{2\sqrt{2}} \propto \frac{V_4}{\Omega} \quad (1.38)$$

Nous voyons qu'à un ensemble de couples (q_x, Ω) tels que $\Omega = 2\sqrt{2} \omega_r/q_x$, situés dans le domaine de validité de l'approche du pseudo-potentiel, correspond le même pseudo-potentiel ω_r . Des dynamiques différentes sont attendues si on considère des paramètres $q_x \ll 1$ ou $q_x \simeq 0, 4$.

L'approximation adiabatique permet d'appréhender la dynamique à l'ordre suivant. Dans le repère cartésien, la partie du mouvement régie par la dynamique rapide du champ rf (cf. équation (1.19)) prend la forme suivante :

$$\vec{\varepsilon} = \varepsilon_x \hat{x} + \varepsilon_y \hat{y} = \frac{q_e \vec{E}}{m\Omega^2} \quad \text{avec} \quad \varepsilon_x = \frac{q_e E_x}{m\Omega^2} = \frac{q_x R_x}{2} \quad (1.39)$$

Appliquée à la géométrie linéaire, l'équation (1.21) décrit le mouvement radial de l'ion. Pour un choix d'origine de phase rf correspondant au potentiel que nous considérons, la composante x de l'équation (1.21) devient :

$$r_x(t) = R_x(t) \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t)\right) \quad (1.40)$$

Présentée sous cette forme, l'équation précédente est appelée l'approximation adiabatique du mouvement de la particule. Cette approximation permet de décomposer le mouvement de l'ion en une superposition de deux mouvements périodiques. Un premier de grande amplitude et de faible fréquence ($\omega/2\pi$), le macro-mouvement, correspondant à la dynamique issue du pseudo-potentiel. A celui-ci se superpose un second mouvement de faible amplitude et de fréquence élevée ($\Omega_r/2\pi$), le micro-mouvement, dû au forçage radio-fréquence. La composante x de la position de la particule s'écrit ainsi :

$$x(t) = x_0 \cos(\omega_x t) \left(1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t)\right) \quad (1.41)$$

où $\omega_x = \omega_r$ ($\phi = 0$). La forme de cette approximation résume à elle seule la spécificité des pièges d'ordres quadrupolaires. Lorsque le piège fonctionne dans un régime de faible q_u et faible a_u (faible au sens précédemment expliqué), (i) le mouvement d'une particule dans le piège est stable et (ii) décrit par une oscillation harmonique de faible fréquence ω_u , dont l'amplitude est modulée à la fréquence rf par (iii) un facteur constant proportionnel au paramètre q_u .

1.3 Multipôles d'ordres supérieurs

Les pièges quadrupolaires constituent un cas très particulier des pièges multipolaires radio-fréquences, aussi nommés de façon générique $2k$ -pôles. En effet, il est possible de généraliser le principe de confinement au moyen de champs radio-fréquences, en augmentant le nombre d'électrodes du piège à un nombre $2k$. La figure 1.6 montre l'exemple de l'octupôle linéaire (pour lequel $2k = 8$). Cependant, pour les pièges d'ordre supérieur au quadrupôle ($k > 2$), ne sont connus aucuns paramètres rigoureux définissant la stabilité, et les trois propriétés énumérées précédemment ne sont pas vérifiées. Le potentiel rf généré par un multipôle linéaire d'ordre k s'exprime très simplement en coordonnées cylindriques par :

$$\Phi_{(2k)l}(r, \phi, t) = [V_{(2k)st} - V_{2k} \cos(\Omega t)] \left(\frac{r}{r_0}\right)^k \cos(k\phi) - \frac{q_e U_{dc}}{2 z_0^2} (r^2 - 2z^2) \quad (1.42)$$

Si nous cherchons, par analogie avec la section 1.1.2, l'expression du terme dépendant du temps dans le système de coordonnées cartésien, nous pouvons développer le terme $r^k \cos(k\phi)$ de la façon suivante :

$$r^k \cos(k\phi) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=0}^k C_k^\alpha x^{k-\alpha} [(iy)^\alpha + (-1)^\alpha (iy)^\alpha] \quad \text{où} \quad C_k^\alpha = \frac{k!}{\alpha! (k-\alpha)!} \quad (1.43)$$

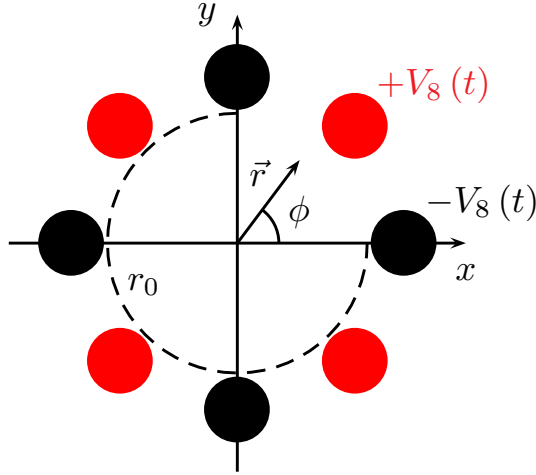


Figure 1.6 – Schéma des électrodes d'un piège octupolaire linéaire dans le plan radial.

Sous cette forme, il est explicite que pour $k > 2$, le champ dérivant du potentiel induit un couplage entre les directions x et y du mouvement dans le repère cartésien. La partie radio-fréquence de l'octupôle linéaire ($k = 4$) s'écrit par exemple :

$$\Phi_{\text{8rf}} = -\frac{V_8 \cos(\Omega t)}{r_0^4} (x^4 + y^4 - 6x^2y^2) \quad (1.44)$$

La dynamique est non-linéaire et il n'existe plus de solution générale à l'équation $\vec{\ddot{r}} = -(q_e/m)\vec{\nabla}\Phi_{(2k)l}$, même dans le cas d'une particule unique. La stabilité d'une solution dépend alors des conditions initiales.

Un exemple de dynamique dans le potentiel Φ_{8rf} est donné en figure 1.7. Pour cette figure, le rayon intérieur r_0 , le potentiel rf appliqué (ici V_8) et les conditions initiales (données par la position et la vitesse initiale de la particule ; l'énergie initiale de la particule est alors différente) sont identiques à ceux de la figure 1.4 dans le cas quadrupolaire. Seul l'ordre du multipôle a été changé. La figure 1.7a montre que pour cette condition initiale existe encore un mouvement périodique de fréquence dix fois plus petite que précédemment. Cependant, alors que dans un potentiel quadrupolaire chaque composante du mouvement évolue de façon indépendante, on constate ici un échange d'énergie entre les composantes qui se traduit, sur l'encart en figure 1.7a, par un échange des amplitudes maximales entre les composantes x et y . On constate aussi que le micro-mouvement est beaucoup moins prononcé sur l'ensemble de la trajectoire. Cela s'explique par le fait que l'amplitude du micro-mouvement de l'ion est proportionnelle au champ local qui augmente en $(r/r_0)^{k-1}$. Ainsi, comme le montre la figure 1.8b, le champ d'un quadrupôle augmente de façon linéaire avec le rapport r/r_0 , alors qu'il reste faible avant d'augmenter brutalement pour un k élevé. Il s'agit d'une caractéristique essentielle des multipôles, plus l'ordre augmente, plus la zone centrale du piège où le champ rf reste relativement faible s'étend. Cette figure montre aussi que pour un même potentiel V_{2k} appliqué sur les électrodes, le champ rf généré possède une amplitude maximale (en $r = r_0$) qui est $k/2$ fois supérieure à celle du quadrupôle. Pour étudier le confinement des particules, il est possible d'utiliser l'approximation du pseudo-potentiel. Dans ce but, E. Teloy et D. Gerlich dans [33, 40] ont déterminé

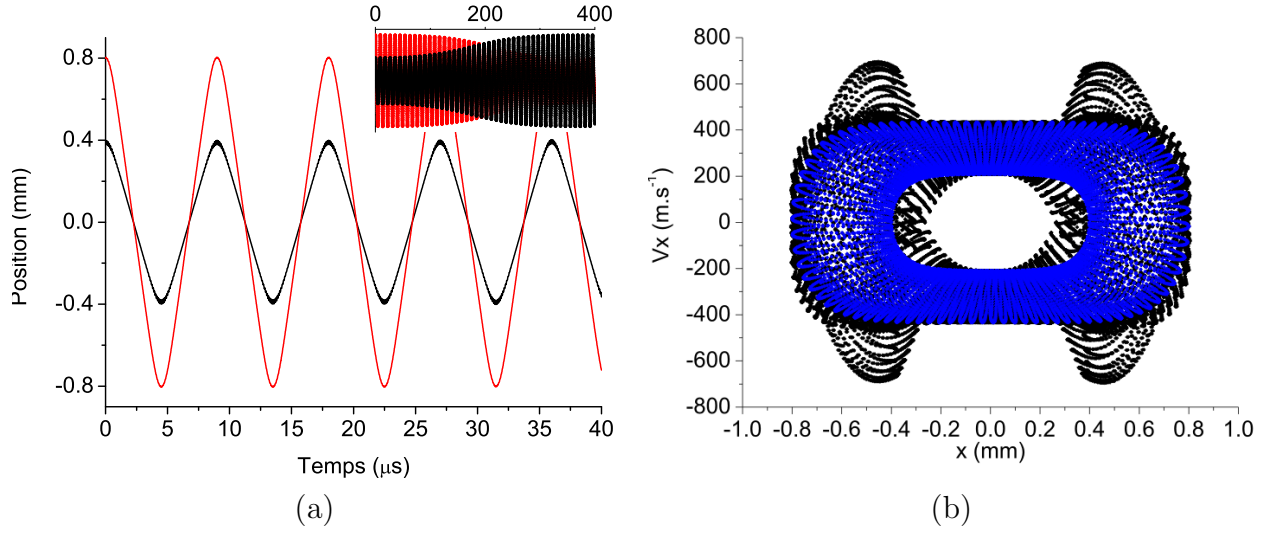


Figure 1.7 – (a) Composantes x (noir) et y (rouge) de la position d'une particule de vitesse initiale nulle, confinée dans le potentiel radio-fréquence Φ_{rf} . L'encart dans l'angle supérieur droit montre l'évolution sur une durée de 400 μs . (b) Evolution de la composante x du mouvement de la particule piégée dans l'espace (x, v_x) pour une durée supérieure à celle présentée en (a). Les points bleus correspondent aux instants t multiples de $2\pi/\Omega = 50$ ns (section de Poincaré).

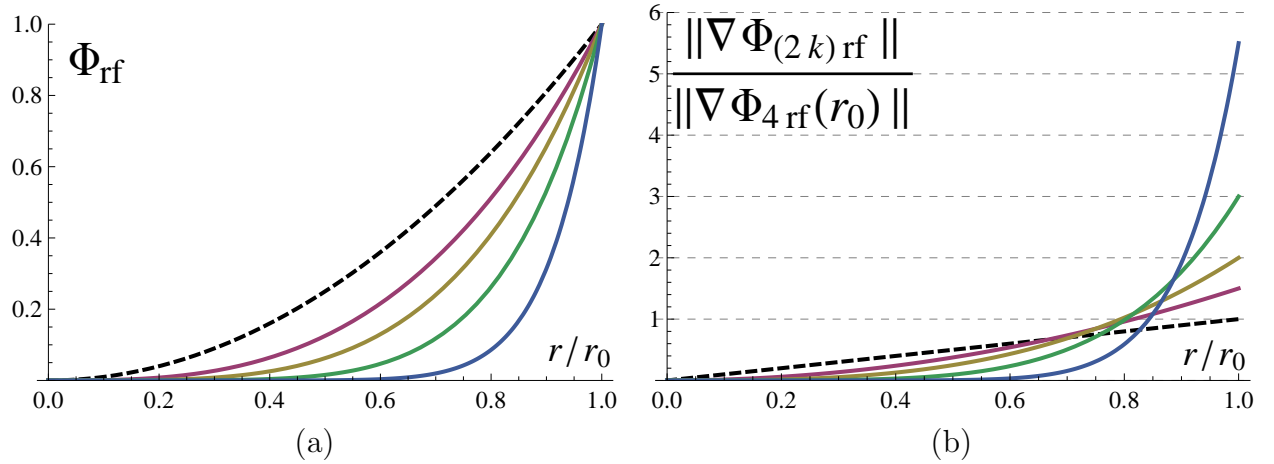


Figure 1.8 – (a) Potentiel radio-fréquence normalisé du quadrupôle (tirets noirs) puis successivement des multipôles d'ordres $k = 3, 4, 6$ et 11 . (b) Normes des champs rf normalisés à la valeur maximale de la norme du champ quadrupolaire.

un paramètre ad hoc d'adiabaticité :

$$\eta_{\text{ad}}(r) = \frac{\|2(\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla})\vec{E}\|}{\|\vec{E}\|} = \frac{q_e}{m\Omega^2} \frac{\|\vec{\nabla}(\vec{E}^2)\|}{\|\vec{E}\|} = 4 \frac{\|\vec{\nabla}(\Psi/q_e)\|}{\|\vec{E}\|} \quad (1.45)$$

$$= \frac{q_x}{2} k(k-1) \left(\frac{r}{r_0}\right)^{k-2} \quad (1.46)$$

où q_x est le paramètre de Mathieu dans lequel le potentiel est V_{2k} et \vec{E} est le champ radio-fréquence. Ce paramètre caractérise, de façon locale, la variation relative du champ rf sur la

distance parcourue par l'ion lors de son micro-mouvement. Remarquons que pour le quadrupôle, le paramètre η_{ad} est indépendant de r et se réduit au paramètre q_x . Une valeur suffisamment faible de ce paramètre assure la stabilité de la trajectoire. Les déterminations numériques et expérimentales [33, 41, 42] donnent :

$$\eta_{ad}(\vec{r}) < 0,36 \quad (1.47)$$

Ainsi, pour un piège d'ordre k , et un potentiel V_{2k} appliqué sur les électrodes, il est possible de définir un rayon maximal d'adiabaticité, r_{ad} , au-delà duquel la dynamique non-linéaire “reprend ses droits” et la stabilité de la trajectoire n'est plus garantie. Remarquons que pour le quadrupôle, cette condition est indépendante du rayon et se réduit à $q < 0,36$, ce qui est une valeur inférieure à la limite réelle donnée par les équations de Mathieu ($\approx 0,9$ pour $a = 0$). La figure 1.9a montre le rayon d'adiabaticité de différents multipôles pour plusieurs valeurs du paramètre q ($\sim V_{2k}$). Sur cette figure, le rayon théorique r_{ad} est pris égal à r_0 lorsque sa valeur est théoriquement supérieure au rayon du piège. Lorsque le critère d'adiabaticité est rempli, il est possible d'utiliser l'approche du pseudo-potentiel pour décrire le confinement. Utilisant l'équation (1.29) nous obtenons de façon immédiate la forme du pseudo-potentiel d'un multipôle linéaire d'ordre k :

$$\Psi_{(2k)l} = \frac{k^2}{4} \frac{q_e^2}{m} \frac{V_{2k}^2}{r_0^2 \Omega^2} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{2k-2} \quad (1.48)$$

Celui-ci est représenté en figure 1.9 pour différentes valeurs de k . La figure montre que plus l'ordre du multipôle est élevé, plus le confinement se rapproche d'un potentiel carré. Bien que la valeur du pseudo-potentiel en $r = r_0$ se comporte en k^2 , nous devons insister sur le fait que le rayon d'adiabaticité est en général inférieur à r_0 . Ainsi, la profondeur du pseudo-potentiel doit être calculée en utilisant le rayon d'adiabaticité, ce qui implique qu'à potentiel rf égal, la profondeur du puits de pseudo-potentiel est plus faible pour les multipôles d'ordres supérieurs que pour les quadrupôles [43]. L'ordre du pseudo-potentiel se comportant en $2k - 2$, il n'est plus possible de décrire le macro-mouvement d'un ion par une oscillation harmonique. En revanche, il est possible d'évaluer l'amplitude locale $\|\vec{\varepsilon}'\|$ du micro-mouvement. Celle-ci conservant la forme de l'équation (1.19), on obtient :

$$\|\vec{\varepsilon}'(r)\| = \frac{\eta_{ad}(r)}{2(k-1)} r \quad (1.49)$$

Ainsi, contrairement au cas du quadrupôle, l'amplitude du micro-mouvement n'augmente plus de façon linéaire avec la distance au centre. Comparant l'équation précédente à l'équation (1.39), le paramètre η_{ad} peut se concevoir comme une généralisation du paramètre de Mathieu q_x .

Dans un tel pseudo-potentiel, pour $k > 2$, un ensemble d'ions suffisamment froid a tendance à fuir le centre du piège sous l'effet de la répulsion coulombienne. Cette propriété, caractéristique des multipôles d'ordre supérieur à 2, a été récemment étudié théoriquement par C. Champenois dans [44]. Dans cet article, se basant sur des considérations de physique statistique des plasmas non-neutres, elle démontre que la densité d'ions $n(r)$ dans un multipôle est indépendante des potentiels de confinement statiques, et est uniquement régie par la compétition entre le potentiel coulombien et le pseudo-potentiel. La densité, à la limite où la température de l'ensemble d'ions tend vers zéro, est alors donnée par :

$$\lim_{T \rightarrow 0} n(r) = \frac{k(k-1)^2}{r_0^2} \frac{\varepsilon_0 V_{2k}^2}{m r_0^2 \Omega^2} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{2k-4} \quad (1.50)$$

où ε_0 est la permittivité diélectrique du vide. Cette formule montre que la densité d'ions est uniforme dans un quadropôle, et diminue au centre du piège pour les ordres supérieurs, rendant compte des résultats récents obtenus numériquement par dynamique moléculaire [45].

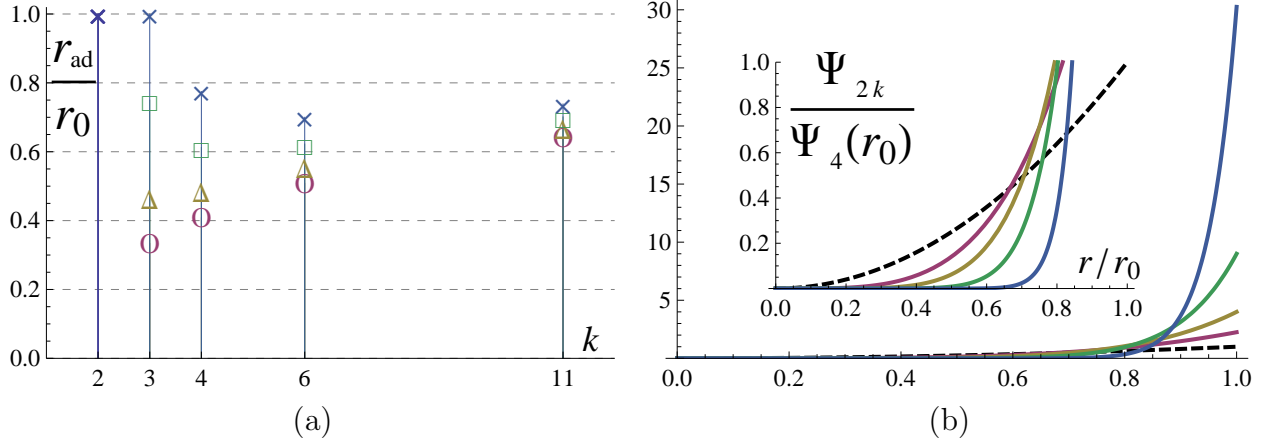


Figure 1.9 – (a) Rayon maximal d'adiabaticité de différents multipôles d'ordre k pour le paramètre de Mathieu $q_x = (O) 0,36, (\Delta) 0,26, (\square) 0,16$ et $(\times) 0,1$. (b) Pseudo-potential d'un multipôle d'ordre $k = 2$ en pointillés, puis successivement $k = 3, 4, 6$ et 11 normalisés à la valeur maximale du pseudo-potential quadropolaire.

Le potentiel de confinement total s'obtient, comme précédemment, en ajoutant les différents potentiels statiques :

$$\Psi_{(2k)l} = \frac{k^2}{4} \frac{q_e^2 V_{2k}^2}{m r_0^2 \Omega^2} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{2k-2} + q_e V_{(2k)st} \left(\frac{r}{r_0} \right)^k \cos(k\phi) - \frac{q_e U_{dc}}{2 z_0^2} (r^2 - 2z^2) \quad (1.51)$$

Ici encore, les considérations découlant de l'analyse de la forme des équations (1.37) sont caduques lorsque $k > 2$. Ainsi, comme le montre la figure 1.10 sur l'exemple de l'octupôle, l'adjonction du potentiel statique nécessaire au confinement longitudinal est responsable de l'existence d'un minimum de potentiel délocalisé sur un cercle de rayon R_{\min} , donné par :

$$R_{\min}^{2k-4} = r_0^{2k-4} \frac{1}{k^2 (k-1)} \frac{m r_0^2 \Omega^2}{q_e^2 V_{2k}^2} m r_0^2 \omega_z^2 \quad (1.52)$$

Ce minimum est indépendant de l'angle ϕ . Cependant, les simulations numériques réalisées pendant ma thèse montrent que si $2k$ ions sont placés dans un tel potentiel, et sont suffisamment froids, ils se positionnent à la distance radiale R_{\min} , selon des angles correspondant aux positions inter-électrodes. Une situation analogue est décrite dans le chapitre 4, où nous montrons que pour un ensemble d'ions froids, disposés en anneau de rayon R_{\min} , et confinés dans un potentiel rf proche de la limite d'adiabaticité de l'équation (1.47), les ions se regroupent en sous-ensembles répartis selon les directions inter-électrodes. Ce comportement laisse penser qu'un second ordre du pseudo-potential reste à déterminer.

Le développement perturbatif du pseudo-potential à la position $r = R_{\min}$ permet d'obtenir la fréquence caractéristique du confinement harmonique local ω_{loc} des ions, au rayon d'équilibre :

$$\omega_{\text{loc}} = \sqrt{k-2} \omega_z \quad (1.53)$$

Cette fréquence de confinement radial dépend donc uniquement de la fréquence du confinement axial et de l'ordre du multipôle.

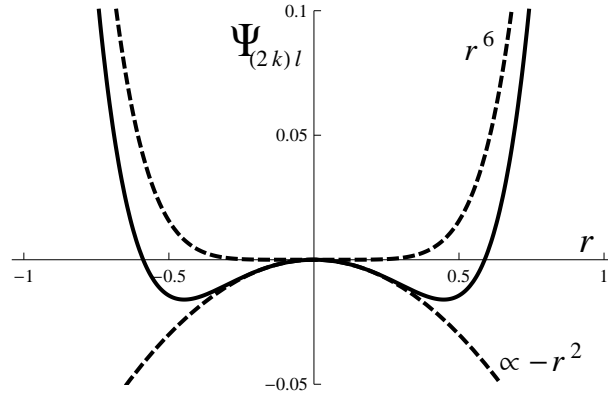


Figure 1.10 – Représentation du minimum du potentiel effectif de confinement engendré par la composante déconfinante du potentiel statique $\propto \omega_z$. Les unités sont arbitraires.

Ainsi, la dynamique du confinement en multipôles d'ordres supérieurs est très différente de celle obtenue dans les quadrupôles. Aucune équation analytique ne permet de décrire le mouvement exact d'un ion individuel. La stabilité des ions dans le piège est conditionnée par une valeur limite, obtenue de façon empirique, du paramètre d'adiabaticité $\eta_{ad}(r)$. Ce paramètre ne dépend pas uniquement des paramètres de fonctionnement du piège rf, mais aussi de la position des ions dans le piège. Le pseudo-potentiel décrivant le confinement effectif n'est plus harmonique ($\propto r^{2k-2}$), et possède un minimum délocalisé sur un cercle de rayon R_{min} dans le plan transverse.

Chapitre 2

Le programme ITraPS

Dans ce chapitre, nous détaillons les outils numériques utilisés pour simuler la dynamique d'un ensemble d'ions évoluant dans le potentiel d'un piège rf, et subissant un refroidissement laser Doppler. Nous présentons tout d'abord la technique de la dynamique moléculaire, ainsi que le principe de la parallélisation des calculs. Nous effectuons ensuite un bilan des interactions prenant part à la dynamique, et évaluons la pertinence de leur prise en compte dans les simulations. Nous présentons ensuite la modélisation du refroidissement Doppler dans le programme, et finissons ce chapitre en explicitant la particularité du calcul de la température en pièges rf.

2.1 Le programme dans son ensemble

Les études numériques sont un moyen d'accompagner un travail expérimental. Elles peuvent être utilisées pour prédire la dynamique attendue dans une expérience, mais elles sont aussi un outils de diagnostic très utile, permettant d'expliquer ou de quantifier des phénomènes observés expérimentalement en donnant accès aux détails fin de la dynamique qui ne peuvent être observés directement de façon expérimentale.

Dans le contexte du confinement d'ions utilisant des champs électriques radio-fréquences, les études numériques ont pris une part de plus en plus importante dans l'expertise des systèmes. Les études initiales modélisaient un ensemble d'ions confinés par un milieu infini, utilisant des conditions de bords périodiques, dans un potentiel effectif statique, utilisant la technique numérique du Monte-Carlo, basée sur des algorithmes de minimisation d'énergie, ou la technique de la dynamique moléculaire, permettant la description de l'évolution temporelle du système. Ces travaux initiaux sont connus sous le nom de OCP pour "One-Component Plasmas" et ont prouvés leur efficacité à prédire des transitions de phases ou d'autres propriétés telles les chaleurs spécifiques par exemple [23, 46, 47].

Cependant, les effets de taille finie, la dynamique non-linéaire ou encore l'aspect non-statique du confinement des ions ont d'importantes conséquences sur la dynamique et la thermodynamique de ces systèmes, et ne peuvent être négligés.

L'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, et le développement de méthodes de parallélisation numériques, ont permis de prendre ces effets en compte et de simuler un nombre fini de particules de plus en plus important sans utiliser de conditions périodiques pour augmenter artificiellement le nombre de particules. De la même façon, cela a permis d'effectuer des calculs numériques simulant des échelles de temps beaucoup plus grandes, ou avec des pas de temps d'intégration encore plus petits, permettant la description des échelles de temps rf, extrêmement rapide, de la dynamique.

Le programme développé à l'occasion de cette thèse, baptisé ITraPS pour "Ions Trapped Parallel Simulator", est un programme de dynamique moléculaire écrit en langage ForTran 90. Ce programme permet l'étude de la dynamique d'ions évoluant au sein du potentiel d'un piège radio-fréquence, et soumis à un refroidissement laser.

La technique de la dynamique moléculaire consiste à construire la trajectoire d'une ou plusieurs particules considérées ponctuelles, étant données les forces auxquelles celles-ci sont soumises à chaque instant. Pour cela :

- le temps est discrétisé en intervalles de temps δt .
- à chaque instant $t_j = j \delta t$, le calcul de la force totale $\vec{F}_j(\vec{x}_j, \vec{v}_j, t_j)$ s'exerçant sur chaque particule est effectué. A cette étape intervient la modélisation des phénomènes physiques.
- les positions et vitesses au temps $t_{j+1} = t_j + \delta t$ sont calculées à partir des positions, vitesses et accélérations aux instants précédents. C'est le rôle de l'algorithme d'intégration d'effectuer ces calculs.

Les principaux éléments caractérisant un programme de dynamique moléculaire sont donc la modélisation des phénomènes physiques, un algorithme d'intégration et un pas de temps δt . La modélisation des phénomènes physiques est discutée dans les sections 2.2 et 2.3 de ce chapitre. Il existe une multitude d'algorithmes d'intégration, et il ne sera pas l'objet de ce paragraphe d'en détailler les rouages ni d'en faire la comparaison. En effet, l'élaboration de ces algorithmes constitue une science en soi. Les conceptions les plus récentes utilisent les outils de la géométrie symplectique et certains algorithmes ont des correspondances directes avec les procédés de renormalisation en théorie des champs. Le lecteur intéressé est renvoyé à l'ouvrage [48] qui en détaille la théorie. Le programme utilise l'algorithme d'intégration nommé Verlet-vitesse. C'est un algorithme très répandu dans les simulations de dynamique moléculaire. Sa forme explicite est la suivante :

$$\vec{r}(t + \delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t) \delta t + \frac{\vec{F}[\vec{r}(t), t]}{2m} (\delta t)^2 \quad (2.1)$$

$$\vec{v}(t + \delta t) = \vec{v}(t) + \frac{\vec{F}[\vec{r}(t + \delta t), t + \delta t] + \vec{F}[\vec{r}(t), t]}{2m} \delta t \quad (2.2)$$

où \vec{r} , \vec{v} et m sont respectivement la position, la vitesse et la masse de la particule, et \vec{F} est la force s'exerçant sur la particule. C'est un algorithme symplectique qui a l'avantage d'être peu gourmand en calculs et d'induire des erreurs qui sont seulement d'ordre $(\delta t)^4$ sur la position et $(\delta t)^2$ sur la vitesse. Il constitue un bon compromis entre vitesse d'exécution et stabilité. Le principal désavantage est qu'il ne permet pas de traiter les forces vitesse-dépendantes puisque le calcul de la vitesse au temps t nécessite la connaissance de la force à ce même instant.

Le choix du pas de temps δt détermine la précision du calcul de la dynamique. Plus le pas de temps est petit, meilleure est la précision. De plus, à chaque phénomène physique est associée un temps caractéristique et le pas de temps doit être choisi suffisamment petit pour résoudre les phénomènes que nous modélisons. Ainsi, le pas de temps doit être inférieur à la plus petite échelle de temps caractéristique des phénomènes modélisés. Ces deux arguments militent pour un pas de temps aussi petit que possible. Cependant, le temps d'exécution d'une simulation, où temps de calcul T_{calcul} , est inversement proportionnel au pas de temps utilisé. En effet, lors d'une simulation où un système évolue pendant un temps simulé T_{evl} , le nombre de pas de temps nécessaire pour calculer la dynamique est égal à $n_{\text{pdt}} = T_{\text{evl}}/\delta t$. Or, à chaque pas de temps, le calcul des forces ainsi que l'appel à l'algorithme d'évolution génèrent un nombre de calculs N_{op} , devant être effectués par le processeur du calculateur.

Ceci engendre un temps de calcul total :

$$T_{\text{calcul}} \propto N_{\text{op}} n_{\text{pdt}} \propto N_{\text{op}} T_{\text{evl}}/\delta t \quad (2.3)$$

Il est nécessaire que le nombre d'opérations devant être effectuées par la machine reste suffisamment faible pour que le calcul soit accompli en un temps raisonnable (de quelques heures à quelques jours). De nouveau, le choix du pas de temps résulte d'un compromis entre une précision de calcul suffisante pour obtenir une description correcte de la dynamique et l'exécution des simulations en un temps raisonnablement court.

Dans le but de réduire les temps de calcul lors des simulations, il est possible d'utiliser plusieurs processeurs simultanément pour effectuer les calculs : c'est la parallélisation.

Parallélisation via OpenMP

La parallélisation est un moyen de réduire le temps de calcul. L'idée est de diviser un calcul en un nombre fini de sous-calculs indépendants, et d'exécuter ces sous-calculs simultanément (en parallèle), en les répartissant sur différents processeurs et/ou différents ordinateurs. La parallélisation ne permet pas de d'effectuer simultanément des calculs correspondant à des pas de temps différents (on ne peut paralléliser le temps), mais permet de diviser le nombre de calculs effectués lors d'un même pas de temps, N_{op} , et de le répartir entre différentes unités de calcul. La division de N_{op} doit, quand cela est possible, permettre de répartir équitablement les calculs, car le temps d'exécution d'un calcul parallèle est souvent limité par le temps d'exécution du sous-calcul le plus long.

La parallélisation peut être effectuée à différents niveaux [49] :

- en l'écrivant dans un langage dédié (ex : ForTran M).
- en utilisant une bibliothèque (ex : MPI).
- par des directives de compilation (ex : OMP).
- par l'utilisation d'un compilateur adapté (ex : Intel ForTran) (très faibles performances).

Les solutions les plus efficaces sont MPI (Message Passing Interface) et OMP (Open Multi-Processing). Elles ne sont néanmoins pas équivalentes et peuvent même s'avérer complémentaires. La différence majeure est que MPI permet de distribuer un calcul sur plusieurs machines, alors que OMP permet une distribution seulement sur différents processeurs d'une même machine. Il est donc évident que MPI offre une plus grande flexibilité. Elle reste cependant plus lourde à mettre en oeuvre. En effet, il est à la charge du programmeur de gérer le passage des messages entre les différentes machines (les noeuds du réseau). Cela demande un apprentissage préalable du fonctionnement et de l'utilisation de MPI, puis d'écrire le programme dans cette optique précise. Débugger le programme devient plus compliqué et nécessite des outils adaptés. OMP est beaucoup plus souple car elle se met en oeuvre au sein d'un programme pré-existant, au moyen de l'insertion de directives adéquates dans le code. Elle ne requiert que quelques remaniements mineurs du programme et le débbugage reste assez simple. Il est aussi possible de combiner ces deux solutions au sein d'un même programme. Pour ces raisons, notre choix s'est porté sur l'implémentation de directives OMP dans le code, le passage à la parallélisation massive via MPI constituera une étape ultérieure.

En pratique, il est difficile d'estimer précisément le gain en temps de calcul qu'apporte la parallélisation. Cela dépend en effet du type de calculs effectués, des échanges de mots mémoires entre les différents processeurs, ainsi que de la façon donc a été parallélisé le code, et de la technologie matérielle utilisée (l'unité de calcul). De façon pragmatique, la parallélisation du programme ITraPS, qui a été effectuée au moyen de OMP, lorsque celle-ci réalise la distribution des calculs sur les huit processeurs de la machine que nous utilisons, permet un gain d'un facteur sept sur le temps de calcul.

2.2 Prise en compte des forces

Dans cette section nous détaillons les forces conservatives prises en compte dans le programme. Nous commençons par effectuer une revue des principales interactions pouvant se rencontrer dans les pièges rf, et en justifions au besoin la négligence. Nous poursuivons en présentant la façon dont les forces pertinentes sont implémentées, et parallélisées, dans le programme.

2.2.1 Les forces en présence

Forces inter-particules

Nous souhaitons faire un bilan des forces en présence dans le système. Considérons tout d'abord les forces générées par les ions eux-mêmes, les plus intenses étant les forces de Lorentz. La charge électrique d'un ion i est responsable d'un champ électrique divergeant \vec{E}_i . Lorsque l'ion i est en mouvement, son déplacement génère un champ magnétique \vec{B}_i . Le programme n'est pas destiné à faire des études de systèmes à très hautes températures et les vitesses des ions restent très peu élevées comparativement à celle de la lumière. Il n'est donc pas nécessaire d'effectuer un traitement relativiste de la dynamique (en distinguant force et accélération). En conséquence, les forces induites par l'ion i sur les autres ions de positions \vec{r} et de vitesses \vec{v} s'écrivent :

$$\vec{F}_L = q_e \left(\vec{E}_i(\vec{r} - \vec{r}_i) + \vec{v} \times \vec{B}_i(\vec{r} - \vec{r}_i, \vec{v}_i) \right) \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \text{avec,} \quad \vec{E}_i(\vec{r} - \vec{r}_i) &= \frac{q_e}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\vec{r} - \vec{r}_i)}{\|\vec{r} - \vec{r}_i\|^3} \\ \vec{B}_i(\vec{r} - \vec{r}_i, \vec{v}_i) &= \frac{\mu_0 q_e}{4\pi} \frac{\vec{v}_i \times (\vec{r} - \vec{r}_i)}{\|\vec{r} - \vec{r}_i\|^3} \end{aligned} \quad (2.5)$$

où \vec{E}_i est le champ électrique de la particule i dû à l'interaction coulombienne, et \vec{B}_i est le champ magnétique produit par le déplacement de cette particule dans le référentiel du piège selon la loi d'Ampère. De façon à évaluer leurs intensités relatives, nous exprimons les normes de ces forces.

$$\|q_e \vec{E}_i\| = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\|\vec{r} - \vec{r}_i\|^2} \quad (2.6)$$

$$\|q_e \vec{v} \times \vec{B}_i\| = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\beta\beta_i}{\|\vec{r} - \vec{r}_i\|^2} |\sin(\vec{v}, \vec{v}_i \times (\vec{r} - \vec{r}_i)) \sin(\vec{v}_i, \vec{r} - \vec{r}_i)| \quad (2.7)$$

avec $\beta = \|\vec{v}\|/c$. Pour obtenir un ordre de grandeur, nous calculons le produit $\beta\beta_i$ en considérant que les vitesses des ions sont de l'ordre de la vitesse quadratique moyenne :

$$\beta\beta_i \sim \frac{\langle \|\vec{v}\|^2 \rangle}{c^2} = \frac{3k_B T}{mc^2} = 2,8 \times 10^{-13} \frac{T(\text{K})}{M(\text{u.m.a.})} \quad (2.8)$$

où M est la masse de l'ion en unités de masse atomique (u.m.a.). Pour une température maximale de $T = 1000$ K et $M = 40$ u.m.a., l'intensité maximale de la force due au champ magnétique de l'ion est inférieure d'un facteur 7×10^{-12} à celle due au potentiel coulombien.

Il est donc justifié de négliger les forces induites par les champs magnétiques des ions en mouvement au profit d'une diminution du temps de calcul, ces forces étant particulièrement gourmandes à l'exécution.

La charge électrique n'est cependant pas seule à interagir avec le champ magnétique. En effet, les spins électroniques et nucléaires, ainsi que les moments cinétiques des électrons dans les orbitales des atomes induisent un moment magnétique $\vec{\mu}_s$. Les ions ressentent donc un potentiel :

$$U_s = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_i \quad (2.9)$$

$$\text{avec } \|\vec{\mu}_s\| = g \frac{q_e}{2m} \|\vec{S}\| \quad \text{et } \|\vec{S}\| \sim \hbar/2 \quad (2.10)$$

où g est le facteur de Landé. Une estimation de la force qui en dérive est donnée par :

$$\|\vec{F}_s\| = \|\vec{\nabla} U_s\| \sim g \frac{q_e}{2m} \frac{\hbar}{2} \frac{\mu_0 q_e}{4\pi} \frac{\|\vec{v}_i\|}{\|\vec{r} - \vec{r}_i\|^3} |\sin(\vec{v}_i, \vec{r} - \vec{r}_i)| \quad (2.11)$$

$$\sim \frac{g \hbar \beta_i}{4m c} \frac{\|q_e \vec{E}_i\|}{\|\vec{r} - \vec{r}_i\|} |\sin(\vec{v}_i, \vec{r} - \vec{r}_i)| \quad (2.12)$$

or,

$$\frac{g \hbar \beta_i}{4m c} \simeq g \frac{\hbar}{4m c} \sqrt{2,8 \cdot 10^{-13} \frac{T(\text{K})}{M(\text{u.m.a.})}} \simeq 2,8 \cdot 10^{-23} g \frac{T^{1/2}(\text{K})}{M^{3/2}(\text{u.m.a.})} \quad (2.13)$$

Nous pouvons estimer une distance $\|\vec{r} - \vec{r}_i\|$ minimale de deux particules entrant en collision frontale dans un gaz à la température T :

$$\|\vec{r} - \vec{r}_i\|_{\min} = \frac{q_e^2 / 4\pi\epsilon_0}{3k_B T} \quad (2.14)$$

Nous obtenons finalement :

$$\|\vec{F}_s\| \sim 5 \times 10^{-18} g \left(\frac{T(\text{K})}{M(\text{u.m.a.})} \right)^{3/2} \|q_e \vec{E}_i\| \quad (2.15)$$

Si nous considérons une température de l'ordre de 1000 K pour des atomes de calcium, le facteur $(T/M)^{3/2}$ est égal à $125 (\text{K/u.m.a.})^{3/2}$. Le facteur de Landé est de l'ordre de l'unité. Nous obtenons une force dont l'amplitude est de 16 ordres de grandeur inférieure à l'interaction coulombienne est sera donc négligée.

Forces de confinement

Nous étudions à présent les forces induites par le piège radio-fréquence. Nous laissons de coté les géométries 3D pour étudier le cas des pièges linéaires. Le potentiel électrique dans le cas général d'un $2k$ -pôle linéaire s'écrit :

$$V_{(2k)l}(t) = [V_{(2k)st} - V_{2k} \cos(\Omega t)] \left(\frac{r}{r_0} \right)^k \cos(k\phi) + \frac{U_{dc}}{z_0^2} (z^2 - r^2/2) \quad (2.16)$$

Nous nous intéressons au champ magnétique généré par la non-stationarité du champ électrique. Puisque ce dernier oscille périodiquement dans le temps, les équations de Maxwell permettent

de déterminer le champ magnétique qui lui est associé. Pour déduire un ordre de grandeur, nous effectuons les calculs dans le cas du quadrupôle linéaire, pour lequel les calculs peuvent être faits aisément. Le potentiel électrique correspondant à cette géométrie s'écrit en coordonnées cartésiennes :

$$V_{4l}(t) = [V_{4st} - V_4 \cos(\Omega t)] \frac{x^2 - y^2}{r_0^2} - \frac{U_{dc}}{2 z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (2.17)$$

La partie radio-fréquence de la force qui en dérive se situe dans le plan transverse du piège et s'écrit :

$$\vec{F}_{E_4}(t) = 2 q_e V_4 \cos(\Omega t) (x \hat{x} - y \hat{y}) / r_0^2 \quad (2.18)$$

Nous obtenons le champ magnétique en résolvant l'équation, partie du système de Maxwell :

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.19)$$

dans laquelle nous posons $\vec{j} = \vec{0}$, c'est à dire un piège vide d'ions. Opérant le gradient sur l'équation (2.17) pour obtenir le champ électrique ($\vec{E} = -\vec{\nabla}V$) puis l'insérant dans (2.19), nous obtenons :

$$\begin{cases} \left[\vec{\nabla} \times \vec{B}_4 \right]_x = \frac{\partial B_{4z}}{\partial y} - \frac{\partial B_{4y}}{\partial z} = -\frac{\Omega}{c^2} V_4 \sin(\Omega t) \frac{2x}{r_0^2} \\ \left[\vec{\nabla} \times \vec{B}_4 \right]_y = \frac{\partial B_{4x}}{\partial z} - \frac{\partial B_{4z}}{\partial x} = \frac{\Omega}{c^2} V_4 \sin(\Omega t) \frac{2y}{r_0^2} \\ \left[\vec{\nabla} \times \vec{B}_4 \right]_z = \frac{\partial B_{4y}}{\partial x} - \frac{\partial B_{4x}}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (2.20)$$

Considérant le piège infini dans la direction z (approximation valable lorsque les ions sont suffisamment éloignés des bords du piège dans cette direction), tous les plans $z = \text{cte}$ deviennent des plans de symétrie. Le champ magnétique ne peut alors dépendre de cette variable, et ses composantes sont nulles dans ces plans. Le système précédent se réduit à :

$$\begin{cases} \frac{\partial B_{4z}}{\partial y} = -\frac{\Omega}{c^2} V_4 \sin(\Omega t) \frac{2x}{r_0^2} \\ \frac{\partial B_{4z}}{\partial x} = -\frac{\Omega}{c^2} V_4 \sin(\Omega t) \frac{2y}{r_0^2} \\ B_{4x} = B_{4y} = 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

Par raison de symétrie, la composante B_z doit être nulle en $r = 0$. L'expression du champ magnétique est alors :

$$\vec{B}_4 = -\frac{\Omega}{c^2} V_4 \sin(\Omega t) \frac{2xy}{r_0^2} \hat{z} \quad (2.22)$$

Nous pouvons maintenant comparer les effets de ce champ magnétique sur les différents degrés de liberté des ions à ceux induits par le champ électrique. Concernant les degrés de liberté externes :

$$\vec{F}_{B_4} = q_e \vec{v} \times \vec{B}_4 \quad (2.23)$$

$$= \frac{\|\vec{v}\| \Omega x}{c^2} q_e V_4 \sin(\Omega t) \frac{2y}{r_0^2} \left(\hat{z} \times \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|} \right) \quad (2.24)$$

$$= \frac{\|\vec{v}\| \Omega x}{c^2} \left(\vec{F}_{E_4}(t - \pi/2) \right)_{|y} \left(\hat{z} \times \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|} \right) \quad (2.25)$$

où \vec{F}_{E4} est la force induite par la partie oscillante du potentiel électrique Φ_{4l} . Dans le but d'obtenir un ordre de grandeur, considérons la vitesse comme étant la vitesse quadratique moyenne et choisissons pour la composante x de la position de la particule, sa valeur maximale r_0 :

$$\|\vec{F}_{B4}\| \simeq \sqrt{\frac{3k_B T}{mc^2}} \frac{\Omega r_0}{c} \|\vec{F}_{E4}\| \simeq 1,8 \times 10^{-15} \Omega r_0 \sqrt{\frac{T(\text{K})}{M(\text{u.m.a.})}} \|\vec{F}_{E4}\| \quad (2.26)$$

Si nous considérons une fréquence $\Omega/2\pi \sim 10$ MHz, un rayon $r_0 = 1$ cm et une température de 1000 K, nous obtenons une force $\|\vec{F}_{B4}\| \sim 10^{-10} \|\vec{F}_{E4}\|$. Ceci constitue une estimation haute puisque la particule se situe alors au rayon maximal dans le piège, la force décroissant linéairement avec le rayon. De même, cette force décroît avec la température et devient nulle dans le cas de structures figées. Bien que ce calcul concerne seulement le quadrupôle linéaire, et que la forme du champ magnétique dépende de toute évidence de l'ordre et de la forme du potentiel multipolaire, peu de différences sont attendues sur cette même estimation dans les autres cas, le champ magnétique se comportant comme $\|\vec{B}\| \sim \|\vec{E}\|/c$, il sera négligeable dans le domaine de vitesse qui nous concerne.

Si nous calculons la force induite par les moments magnétiques intrinsèques des atomes, nous obtenons de façon analogue à l'équation (2.11) :

$$U_{4s} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_4 \quad (2.27)$$

$$\|\vec{F}_{4s}\| = \frac{g \hbar \Omega}{4 mc^2} \underbrace{q_e V_4 \sin(\Omega t) \frac{2 r}{r_0^2}}_{\text{ordre} \sim \|\vec{F}_{E4}\|} \quad (2.28)$$

or, pour une fréquence $\Omega/2\pi = 10$ MHz et la masse du Calcium, nous obtenons $\hbar \Omega/mc^2 = 5 \times 10^{-18}$, ce qui permet de négliger cette force devant la force due au potentiel électrique.

En définitive, nous prenons uniquement en compte l'interaction coulombienne et la force électrique permettant le confinement des particules. Toutes les autres interactions seront négligées au profit d'un gain en temps de calcul. Remarquons que toutes les forces négligées dépendant de la vitesse des ions, cette approximation de la dynamique est d'autant meilleure que nous étudions des systèmes à basse température.

2.2.2 Algorithmes de calcul des forces

Interaction coulombienne

Considérons l'interaction coulombienne entre deux ions i et j . Le calcul de la force s'effectue en deux temps : on calcule tout d'abord le potentiel d'interaction U_{ij} puis on ajoute le terme approprié aux trois composantes de la force totale F_x , F_y et F_z . Ainsi, pour le couple de particules i et j , nous effectuons :

- le calcul du potentiel d'interaction :

$$U_{ij} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q(j)Q(i)}{\|\vec{r}_j - \vec{r}_i\|} \quad (2.29)$$

où $Q(i)$ est le nombre algébrique de charges de l'ion numéro i . Le code réalisant ce calcul est le suivant :

```

    rjix = rx(j) - rx(i)
    rjiy = ry(j) - ry(i)
    rjiz = rz(j) - rz(i)
    rji = sqrt(rjix**2 + rjiy**2 + rjiz**2)
    uji = alpha_em * q(j)*q(i) / rji

```

où nous avons préalablement défini la constante $\text{alpha_em} = q_e^2/4\pi\epsilon_0$.

– le calcul de la force exercée sur chaque particule :

$$\vec{F}_{int\ i} = -\vec{\nabla}_i U_{ij} = -\frac{U_{ij}}{\|\vec{r}_j - \vec{r}_i\|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \quad (2.30)$$

$$\vec{F}_{int\ j} = -\vec{\nabla}_j U_{ij} = +\frac{U_{ij}}{\|\vec{r}_j - \vec{r}_i\|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \quad (2.31)$$

Soit pour les composantes x des forces par exemple :

```

    Fxji = uji * rjix/rji**2
    Fx(i) = Fx(i) - Fxji
    Fx(j) = Fx(j) + Fxji

```

Ces calculs sont imbriqués dans une double somme courant sur les deux indices i et j , analogue à celle du calcul de l'énergie potentielle coulombienne totale, pour laquelle chaque couple de particules n'apparaît qu'une seule fois :

$$\begin{array}{l}
 \text{do } i = 1, N_p-1 \\
 \quad \text{do } j = i+1, N_p \\
 \quad \quad \dots \\
 \quad \text{end do} \\
 \text{end do}
 \end{array}
 \quad
 U_C = \sum_{i=1}^{N_p-1} \sum_{j=i+1}^{N_p} U_{ij} \quad (2.32)$$

Ceci est réalisé au moyen de deux boucles `do` imbriquées. La parallélisation semble immédiate, il suffit de diviser la boucle externe par le nombre de processeurs disponibles au moyen de la directive `PARALLEL DO`. Si on procède de cette façon, le nombre total de paires de particules sera réparti inégalement entre les différents processeurs. En effet, la boucle interne sur j correspondant à une particule i , comporte $(N_p - i)$ paires. Soit $P_i(j)$ le terme de l'interaction coulombienne faisant intervenir le couple de particules i et j :

$$\sum_{j=i+1}^{N_p} P_i(j) = P_i(i+1) + P_i(i+2) + \dots + P_i(N_p-1) + P_i(N_p) \Rightarrow (N_p - i) \text{ termes} \quad (2.33)$$

Plus l'indice i est élevé, moins sa boucle interne comporte de termes. Ceci aura pour effet de surcharger les processeurs s'occupant des premières particules de la boucle externe en allégeant ceux s'occupant des dernières (dernières valeurs de l'indice i). Or, le temps de calcul est limité par le processeur qui possède le temps de calcul le plus long, c'est à dire celui s'occupant du

début de la boucle externe. Si P est le nombre de processeurs disponibles, le premier processeur se verra attribuer un nombre de termes :

$$\begin{aligned}
 \text{Nb}_{\text{process1}} &= \sum_{i=1}^{N_p/P} \sum_{j=i+1}^{N_p} 1 = \sum_{i=1}^{N_p/P} (N_p - i) \\
 &= (N_p - 1) + (N_p - 2) + \dots + \left(N_p - \left(\frac{N_p}{P} - 1\right)\right) + \left(N_p - \frac{N_p}{P}\right) \\
 &= \frac{N_p}{2P} \left(2N_p - \frac{N_p}{P} - 1\right)
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Or, si le calcul était convenablement réparti, chaque processeur se verrait attribuer une quantité égale de termes à calculer, c'est à dire le nombre total de termes divisé par le nombre de processeurs disponibles :

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{1}{P} \sum_{i=1}^{N_p} \sum_{j=i+1}^{N_p} 1 = \frac{1}{P} \sum_{i=1}^{N_p} (N_p - i) \\
 &= \frac{1}{P} \{(N_p - 1) + (N_p - 2) + \dots + (N_p - (N_p - 1)) + (N_p - N_p)\} \\
 &= \frac{1}{P} \frac{N_p}{2} (N_p - 1)
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Le rapport des temps de calcul des deux répartitions précédentes est alors proportionnel à :

$$\alpha_{\text{th}} = \frac{I}{\text{Nb}_{\text{process1}}} = \frac{(N_p - 1)}{(2 - 1/P) N_p - 1} \xrightarrow{N_p \gg 1} \frac{1}{2 - 1/P} \tag{2.36}$$

On constate que pour un nombre de particules assez élevé, ce coefficient tend rapidement vers $1/2$ avec le nombre de processeurs disponibles, ce qui revient à effectuer la parallélisation avec un nombre de processeurs effectifs $P/2$. Or, aucune des trois clauses de la directive **PARALLEL DO** ne permet une redistribution automatique de l'indice i entre les processeurs pour traiter correctement un problème à N corps. La solution que nous adoptons est donc de redistribuer la boucle interne de façon explicite en fonction de l'indice i . Remarquons pour cela que, par analogie avec la dernière égalité de l'équation (2.35), la somme de deux boucles internes symétriques par rapport à la somme sur i , c'est à dire les couples $(i, N_p - i + 1)$, a la propriété de toujours comporter un nombre de paires égal à $(N_p - 1)$. Nous allons donc ré-écrire la double somme de façon à faire apparaître ces couples sur chaque indice i :

$$\sum_{i=1}^{N_p} \sum_{j=i+1}^{N_p} P_i(j) = \sum_{i=1}^{N_p/2} \sum_{j=i+1}^{N_p} P_i(j) + \sum_{k=1+N_p/2}^{N_p} \sum_{l=k+1}^{N_p} P_k(l) \tag{2.37}$$

De plus, l'ordre dans lequel s'effectuent les calculs est sans importance, ce que nous traduisons par l'inversion des bornes du signe \sum :

$$\sum_{k=1+N_p/2}^{N_p} \sum_{l=k+1}^{N_p} P_k(l) = \sum_{k=N_p}^{1+N_p/2} \sum_{l=k+1}^{N_p} P_k(l) = \sum_{i=1}^{N_p/2} \sum_{l=N_p-i+2}^{N_p} P_{N_p-i+1}(l) \tag{2.38}$$

où la dernière égalité est obtenue à l'aide du changement de variable $k = N_p - i + 1$. La double somme se ré-écrit donc :

$$\sum_{i=1}^{N_p} \sum_{j=i+1}^{N_p} P_i(j) = \sum_{i=1}^{N_p/2} \left(\sum_{j=i+1}^{N_p} P_i(j) + \sum_{l=N_p-i+2}^{N_p} P_{N_p-i+1}(l) \right) \quad (2.39)$$

Ainsi écrite, la double boucle comporte un nombre égal de paires pour chaque valeur de l'indice i . La boucle externe courant sur i peut maintenant être divisée en parts égales et répartie sur tous les processeurs qui effectueront ainsi un nombre égal de calculs. Néanmoins, en exprimant la boucle externe de cette façon, nous devrons, dans le cas d'un nombre de particules impair, calculer les interactions de la particule $i = 1 + (N_p - 1)/2$ hors de la boucle.

De plus, du fait de l'interaction par paire (et non de la redistribution précédente), deux processeurs différents peuvent essayer d'accéder à la même ligne (même particule) d'une matrice des composantes de la force totale en même temps. La version d'OMP que nous possédons ne permet pas de s'affranchir d'une telle difficulté (partage d'un vecteur). La solution [50] consiste à dupliquer les matrices de façon à en allouer une par processeur. Ces matrices sont remplies pendant l'exécution de la double boucle, puis sommées à l'extérieur pour obtenir les matrices \mathbf{F}_x , \mathbf{F}_y et \mathbf{F}_z . Chaque processeur est libellé par un numéro $\{0, 1, \dots, P-1\}$, accessible par l'instruction `OMP_GET_THREAD_NUM()` :

```
!$OMP PARALLEL DO
do i= 1, Np/2
  num_p = OMP_GET_THREAD_NUM()+1
  do j= i+1, Np
    ...
    Fxp(i,num_p) = Fxp(i,num_p) + Fxji
    Fxp(j,num_p) = Fxp(j,num_p) - Fxji
  end do
  do j= Np-i+2, Np
    ...
    Fxp(Np-i+1,num_p) = Fxp(Np-i+1,num_p) + Fxji
    Fxp(j,num_p) = Fxp(j,num_p) - Fxji
  end do
end do
!$OMP END PARALLEL DO
if(mod(Np,2) /= 0) then
  do j= 2+(Np-1)/2, Np
    ...
    Fx(1+(Np-1)/2) = Fx(1+(Np-1)/2) + Fxji
    Fx(j) = Fx(j) - Fxji
  end do
end if

```

puis

```
!$OMP PARALLEL DO
do i=1,Np
  do j=1,P
    Fx(i)=Fx(i)+Fxp(i,j)
  end do
end do
!$OMP END PARALLEL DO

```

Si nous comparons le rapport α_{num} , obtenu en effectuant le calcul numérique par chacune des méthodes, puis en faisant le rapport des temps de calcul obtenus, au rapport α_{th} de l'équation (2.36), on constate l'existence de plusieurs pics, qui restent néanmoins inférieurs à 1 (fig.2.1). Ces pics demeurent pour l'instant inexpliqués. Effectuant plusieurs exécutions

successives d'un même calcul, on constate une faible variance du temps d'exécution, qui n'est pas représentée sur la figure, mais qui ne peut être la cause des pics obtenus.

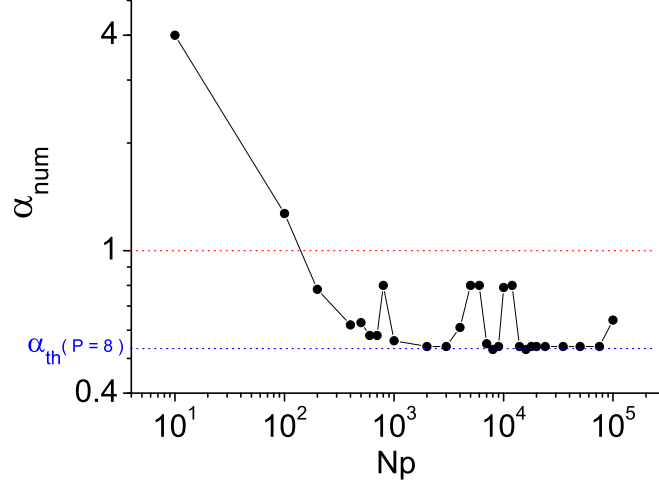


Figure 2.1 – Test numérique du rapport des temps de calcul de chaque parallélisation de la boucle `do`. La ligne en pointillés bleus indique le rapport théorique correspondant à $P = 8$ dans la limite où N_p est très grand devant 1.

Dans le cas de l'interaction coulombienne, la parallélisation trouve naturellement sa place car l'interaction par paire impose de traiter chaque terme des matrices force indépendamment, par l'exécution de boucles `do` sur le nombre de particules. Cela n'est pas le cas pour la force électrique induite par le champ radio-fréquence du piège.

Forces de confinement

Les forces de confinement implémentées dans le programme sont les forces dérivant des potentiels radio-fréquences, notés Φ , et des pseudo-potentiels associés, notés Ψ , suivants :

– Quadrupôle 3D :

$$\begin{aligned}\Phi_{4(3D)} &= \frac{q_e [V_{4st} - V_4 \cos(\Omega t)]}{r_0^2 + 2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \\ \Psi_{4(3D)} &= \frac{q_e^2 V_4^2}{m (r_0^2 + 2z_0^2)^2 \Omega^2} (x^2 + y^2 + 4z^2) + \frac{q_e V_{4st}}{r_0^2 + 2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2)\end{aligned}\tag{2.40}$$

– Quadrupôle linéaire :

$$\begin{aligned}\Phi_{4l} &= \frac{q_e [V_{4st} - V_4 \cos(\Omega t)]}{r_0^2} (x^2 - y^2) - \frac{q_e U_{dc}}{2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \\ \Psi_{4l} &= \frac{q_e^2 V_4^2}{m r_0^4 \Omega^2} (x^2 + y^2) + \frac{q_e V_{4st}}{r_0^2} (x^2 - y^2) - \frac{q_e U_{dc}}{2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2)\end{aligned}\tag{2.41}$$

– Octupôle linéaire :

$$\begin{aligned}\Phi_{8l} &= \frac{q_e [V_{8st} - V_8 \cos(\Omega t)]}{r_0^4} (x^4 + y^4 - 6 x^2 y^2) - \frac{q_e U_{dc}}{2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \\ \Psi_{8l} &= \frac{4q_e^2 V_8^2}{m r_0^8 \Omega^2} (x^2 + y^2)^3 + \frac{q_e V_{8st}}{r_0^4} (x^4 + y^4 - 6 x^2 y^2) - \frac{q_e U_{dc}}{2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2)\end{aligned}\quad (2.42)$$

Lorsque non-parallélisé, le calcul des composantes des forces est vectorisé. La question se pose alors de savoir s'il faut paralléliser la vectorisation (code S), c'est à dire attribuer chaque composante dont le calcul est vectorisé à un processeur différent (ce qui revient à faire travailler trois processeurs en parallèle quel que soit le nombre de processeurs disponibles), ou s'il vaut mieux l'exécuter par une boucle `do` (code D), de façon à paralléliser la boucle par un nombre plus important de processeurs mais perdre l'avantage du vectoriel.

```
!$OMP PARALLEL SECTIONS
```

```
!$OMP SECTION
```

```
Fx = Fx + f_x(rx,ry,rz)
```

```
!$OMP SECTION
```

```
Fy = Fy + f_y(rx,ry,rz)
```

```
!$OMP SECTION
```

```
Fz = Fz + f_z(rx,ry,rz)
```

```
!$OMP END PARALLEL SECTIONS
```

code S

```
!$OMP PARALLEL DO
```

```
do i= 1, Np
```

```
    Fx(i) = Fx(i) + f_x(rx(i),ry(i),rz(i))
```

```
    Fy(i) = Fy(i) + f_y(rx(i),ry(i),rz(i))
```

```
    Fz(i) = Fz(i) + f_z(rx(i),ry(i),rz(i))
```

```
end do
```

```
!$OMP END PARALLEL DO
```

code D

Les paramètres qui caractérisent ces deux implémentations possibles sont :

- le nombre de particules N_p .
- le nombre d'opérations dans les fonctions \mathbf{f}_x , \mathbf{f}_y et \mathbf{f}_z , soient : N_x , N_y et N_z .
- le nombre de processeurs disponibles P .

Essayons une estimation du rapport des temps de calcul de ces deux solutions. La vectorisation engendre un nombre d'opérations effectives \tilde{N} inférieur à la réalité (d'où son intérêt) : $\tilde{N}_x \tilde{N}_p = \alpha_V N_x N_p$, avec $\alpha_V < 1$, il en est de même pour y et z . En pratique, le coefficient α_V dépend de N_p ainsi que du type des opérations effectuées. La parallélisation sous forme de sections (code S) implique que le temps nécessaire à l'exécution du calcul T_{sections} est limité par la section de temps d'exécution T la plus longue, c'est à dire celle contenant $\max\{N_x, N_y, N_z\}$, par conséquent :

$$T_{\text{sections}} = T(\alpha_V N_p \max\{N_x, N_y, N_z\}) = \alpha_V N_p T(\max\{N_x, N_y, N_z\}) \quad (2.43)$$

La forme de la solution avec boucle (code D) rend la dépendance des paramètres explicite :

$$T_{\text{boucle}} = \frac{N_p}{P} T(N_x + N_y + N_z) \leq 3 \frac{N_p}{P} T(\max\{N_x, N_y, N_z\}) \quad (2.44)$$

nous avons alors :

$$T_{\text{boucle}} \leq 3 \frac{N_p}{P} \frac{T_{\text{sections}}}{\alpha_V N_p} = \frac{3}{P \alpha_V} T_{\text{sections}} \quad (2.45)$$

La solution sous forme de boucle est donc avantageuse si $P \geq 3/\alpha_V$. Cette estimation est très grossière et fait l'hypothèse que les pertes de temps inhérentes au processus de parallélisation

sont négligeables devant le temps de calcul. La méconnaissance de la forme et de la valeur du coefficient α_V nous empêche de mener à terme cette estimation. Pour déterminer quel schéma de calcul adopter, nous procédons de façon systématique, en essayant les deux solutions sur le potentiel rf du quadrupôle linéaire, que nous estimons représentatif des potentiels possibles. Pour effectuer la comparaison, nous utilisons les 8 processeurs de la machine.

N_p	10	10^2	10^3	10^4
T_D/T_S	1.39 ± 0.05	1.33 ± 0.02	0.99 ± 0.06	0.51 ± 0.01

Table 2.1 – *Rapports des temps de calcul T_D/T_S en fonction du nombre de particules N_p . Résultats obtenus en utilisant le potentiel Φ_{4l} .*

Les résultats obtenus en utilisant 8 processeurs montrent une équivalence des deux méthodes pour $N_p \sim 10^3$ et sont clairement en faveur de la solution sous forme de boucle pour des valeurs supérieures de N_p . Si nous devons faire le choix de l'implémentation à adopter, il se porterait donc sur la parallélisation sous forme de boucle. En effet, même si nous pouvons être amenés à simuler des systèmes de quelques particules à plusieurs milliers, ces pourcentages de temps doivent être ramenés au nombre de particules pour lesquelles le calcul est effectué. Ainsi, lorsque nous simulons 100 particules, cela correspond au temps de 133 particules effectives, soit 33 particules de plus, mais lorsque nous en simulons 10000, le gain sera d'environ 5000 particules. Cependant, il est encore préférable de faire preuve de souplesse et d'implémenter les deux solutions dans le programme afin de pouvoir utiliser la solution convenable pour l'étude à réaliser.

2.3 Modélisation du refroidissement Doppler

Le but étant de simuler des ensembles d'ions refroidis par laser, nous commençons cette section par une description du principe du refroidissement laser Doppler. Après un bref rappel sur l'obtention des probabilités de transition d'un atome soumis à un champ électromagnétique dans le domaine optique, ce qui permettra d'explicitier les différentes approximations nécessaires, nous présentons l'implémentation du refroidissement Doppler dans le programme. Dans la dernière partie de la section, nous validons cette modélisation en nous plaçant dans des conditions pour lesquelles un modèle analytique du refroidissement Doppler existe, et y confrontons les résultats des simulations numériques.

2.3.1 Le refroidissement Doppler

L'idée d'utiliser un rayonnement électromagnétique dans le but de modifier la température d'un milieu date de l'année 1950, durant laquelle Alfred Kastler envisage la possibilité d'effets lumino-caloriques et lumino-frigoriques par l'emploi de lumière polarisée sur des vapeurs atomiques et des cristaux de terres rares [51]. Il existe de nos jours de nombreuses techniques de refroidissement impliquant les champs lasers [52–54], dont certaines permettent de refroidir les atomes jusqu'à la limite permise par la mécanique quantique (le niveau fondamental de leur potentiel harmonique de confinement, voir [55, 56]), et pouvant être mises en oeuvre pour des atomes ionisés comme neutres. Pour ces derniers, l'interaction laser-atome peut être mise à profit pour confiner des atomes au sein de mélasses optiques [57–60], pour lesquelles le prix Nobel, décerné en 1997 sous l'intitulé “pour le développement de méthodes pour refroidir et piéger des atomes avec des champs lasers”, récompensa S. Chu, C. Cohen-Tannoudji et W.D. Phillips [54, 61, 62].

Parmi les techniques de refroidissement laser, la première à avoir été utilisée est le refroidissement Doppler. Son principe date de l'année 1975, et est indépendamment dû à T.W. Hänsch et A.L. Schawlow [3], dans le cas d'atomes neutres, et à D.J. Wineland et H.G. Dehmelt [4], dans le cas d'atomes ionisés. La mise en oeuvre de cette technique est différente dans le cas d'atomes neutres, pour lesquels plusieurs lasers sont nécessaires, et dans le cas d'atomes ionisés confinés en piège rf, pour lesquels un unique laser peut suffire. Une importante littérature traite du refroidissement d'atomes par des champs laser dans le cas d'atomes ionisés confinés en piège rf, notamment [27, 63–68].

Le principe du refroidissement Doppler est le suivant : considérons un atome possédant une transition à la fréquence $\omega_0/2\pi$, de largeur naturelle Γ_0 . Si cet atome est soumis à un champ électromagnétique de pulsation ω_L , il existe une probabilité non nulle pour que l'atome absorbe un photon du champ. Cette probabilité d'absorption est fonction de la fréquence de l'onde. Lors d'une absorption, une impulsion $\Delta\vec{p} = \hbar\vec{k}_L$, où $\|\vec{k}_L\| = \omega_L/c$ est le vecteur d'onde du laser, est transférée à l'atome. Si l'atome et l'onde laser sont co-propageant, l'absorption du photon induit une accélération de l'atome. Au contraire, s'ils sont contra-propageant, l'absorption donne lieu à une décélération. Le refroidissement Doppler consiste à favoriser la décélération des atomes en tirant parti de l'effet Doppler-Fizeau. Cet effet implique que la fréquence de l'onde perçue par l'atome dépend de la vitesse de ce dernier. Lorsque l'atome et l'onde sont co-propageant, la fréquence apparente de l'onde diminue et, à l'inverse, elle augmente lorsque l'onde et l'atome sont contra-propageant. Ainsi, pour un désaccord laser $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ négatif convenablement choisi, un atome co-propageant perçoit un désaccord négatif, supérieur en valeur absolue à $|\delta_L|$, et voit sa probabilité d'absorption diminuée, alors qu'un atome contra-propageant perçoit une

fréquence laser plus proche de la résonance, augmentant sa probabilité d'absorption. Ainsi, en moyenne, et pour un δ_L approprié, le phénomène d'absorption favorise la décélération des atomes et conduit à une diminution de l'énergie cinétique.

Une fois le photon absorbé, l'atome se trouve dans l'état excité. Il peut alors se désexciter par émission stimulée, auquel cas la quantité d'impulsion $\Delta\vec{p}$ est rendue au champ laser, ce qui diminue l'efficacité du refroidissement. Si l'atome se désexcite par émission spontanée, le caractère aléatoire et isotrope du phénomène résulte en un effet moyen nul sur les vitesses moyennes des ions. En revanche, ce phénomène est responsable de l'analogie d'une marche aléatoire dans l'espace des impulsions des atomes et constitue un effet limitant la température atteinte [57, 63]. La compétition entre l'absorption des photons permettant le refroidissement des atomes et le phénomène d'émission spontanée donnant lieu à une diffusion dans l'espace des impulsions des atomes, conduit à l'obtention d'une température d'équilibre. La température stationnaire minimale accessible par ce type de refroidissement, appelée la température limite Doppler T_D , est proportionnelle à la largeur naturelle de la transition, Γ_0 .

Pour qu'il soit efficace, le refroidissement Doppler nécessite de très nombreuses interactions entre les photons du champ laser et les atomes, afin que le taux de refroidissement des atomes soit supérieur aux différents taux de chauffage pouvant exister dans les pièges rf. Ceci requiert tout d'abord l'existence d'un important couplage entre l'atome et le champ laser, c'est-à-dire une valeur non négligeable du dipôle électrique permettant la transition atomique, ainsi qu'une intensité laser suffisante. Pour finir, notons que le processus d'absorption-émission des photons doit résulter en un cycle fermé, c'est-à-dire que la désexcitation doit ramener l'atome à son état initial, permettant une nouvelle transition par l'intermédiaire du couplage laser. Cela ne fonctionne donc pas si l'espèce à refroidir est une molécule, car ses différents degrés de liberté internes (vibrations, rotations) dispersent les populations sur différents niveaux d'énergie, dont un seul est en général couplé au champ laser.

2.3.2 Calcul des populations

Afin de justifier la modélisation du refroidissement Doppler implémentée dans le programme, nous commençons par rappeler brièvement la théorie usuelle. Une importante littérature traite du sujet, notamment [52, 69–73]. Ce problème est complexe et l'obtention de solutions analytiques n'est rendue possible qu'au moyen d'approximations successives. Le développement suivant utilise l'approche semi-classique dans laquelle un atome, traité de façon quantique, interagit avec une onde électromagnétique classique. Nous faisons l'approximation que seule la composante électrique de l'onde laser produit un effet significatif sur l'atome ; les interactions magnétiques leur étant de deux ordres de grandeur inférieures, elles ne seront pas prises en compte. Le champ électrique \vec{E} est représenté par une onde monochromatique plane de fréquence ω_L .

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_L \cos(\vec{k}_L \cdot \vec{r} - \omega_L t) \quad (2.46)$$

La fréquence laser considérée se situe dans le domaine optique et, dans le vide, la longueur d'onde λ_L d'un tel rayonnement est comprise dans un intervalle $0,1 \mu\text{m} \lesssim \lambda_L \lesssim 1 \mu\text{m}$ ($\lambda_0 \approx 397 \text{ nm}$ dans le cas présent), alors que les dimensions atomiques sont de l'ordre du nanomètre. Ceci permet de se placer dans l'approximation dipolaire, encore appelée approximation des grandes longueurs d'onde, qui consiste à considérer que le champ électrique est constant sur l'étendue de l'atome, et égal au champ en son centre :

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_L \cos(\omega_L t) \quad (2.47)$$

où le noyau de l'atome, considéré immobile, est pris en $\vec{r} = \vec{0}$.

Le refroidissement Doppler des ions calcium s'effectue en utilisant la transition du niveau fondamental $4^2S_{1/2}$, noté $|g\rangle$, vers le niveau excité $4^2P_{1/2}$, noté $|e\rangle$, à 397 nm. Le niveau excité possède une durée de vie moyenne de $1/\Gamma_0 \approx 7$ ns. Lorsque l'atome est excité, il peut soit retourner dans son état fondamental, et ainsi permettre une nouvelle transition de refroidissement, soit se désexciter vers l'état métastable $3^2D_{3/2}$ dont la durée de vie est de l'ordre de la seconde [74], brisant ainsi le cycle permettant le refroidissement. Bien que le rapport de branchement du niveau excité vers le niveau métastable soit d'environ 6% [75, 76], la différence entre les temps de vie de ces deux niveaux est suffisamment importante pour aboutir au pompage de la population atomique dans le niveau $3^2D_{3/2}$. Pour éviter ce scénario, un laser repompeur à 866 nm est utilisé pour coupler les niveaux $4^2P_{1/2}$ et $3^2D_{3/2}$, et ainsi dépeupler ce dernier. De plus, ce niveau est suffisamment éloigné du niveau $|e\rangle$ pour ne pas être couplé au niveau fondamental par le laser de refroidissement. Nous limitons donc la description de l'atome aux deux niveaux $|g\rangle$ et $|e\rangle$. Ces deux états sont vecteurs propres du hamiltonien de l'atome libre H_0 :

$$\begin{aligned} H_0|g\rangle &= E_g|g\rangle, \\ H_0|e\rangle &= E_e|e\rangle, \end{aligned} \quad (2.48)$$

avec les valeurs propres telles que $E_e - E_g = \hbar\omega_0 > 0$. L'hamiltonien du système total, H , est la somme du hamiltonien de l'atome libre, H_0 , et du terme d'interaction H_{int} :

$$H = H_0 + H_{\text{int}} \quad (2.49)$$

La forme du terme d'interaction n'est pas unique. Elle dépend de la jauge utilisée pour décrire le champ laser. L'approximation des grandes longueurs d'ondes effectuée plus haut est bien adaptée à l'utilisation de la jauge de Göppert-Mayer [77]. Dans celle-ci, le hamiltonien d'interaction prend la forme :

$$H_{\text{int}} = -\vec{d} \cdot \vec{E}(t) \quad (2.50)$$

où \vec{d} est l'opérateur moment dipolaire électrique de l'atome : $\vec{d} = q_e \vec{r}$, avec $q_e < 0$ la charge électrique de l'électron, et \vec{r} l'opérateur position de l'électron effectuant la transition au sein de l'atome. On définit la pulsation de Rabi Ω_L par :

$$\Omega_L = -\langle e|\vec{d} \cdot \vec{E}_L|g\rangle/\hbar = -\frac{q_e\|\vec{E}_L\|}{\hbar}\langle e|d|g\rangle \quad (2.51)$$

où d est la composante du moment dipolaire sur la direction de polarisation de l'onde laser. La pulsation de Rabi caractérise le couplage de l'atome au champ laser via la transition $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ ou de façon symétrique $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$.

Afin de prendre en compte le phénomène d'émission spontanée, il est utile d'introduire l'opérateur densité. Rappelons que l'opérateur densité ρ pour un atome à deux niveaux est donné dans la base des états propres du hamiltonien par la matrice hermitienne :

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{ee} & \rho_{eg} \\ \rho_{ge} & \rho_{gg} \end{pmatrix}_{\{|e\rangle, |g\rangle\}} \quad \text{avec} \quad \rho_{ee} + \rho_{gg} = 1 \quad (2.52)$$

dans laquelle les éléments ρ_{ee} et ρ_{gg} sont les termes de population donnant la probabilité d'occupation des états, et ρ_{eg} et ρ_{ge} sont nommés termes de cohérence et contiennent la phase relative des états. L'évolution hamiltonienne (*i.e.* sans émission spontanée) de l'opérateur densité est donnée par :

$$i\hbar \dot{\rho} = [H, \rho] = [H_0, \rho] + [H_{\text{int}}, \rho] \quad (2.53)$$

L'émission spontanée qui résulte du couplage avec le champ électromagnétique du vide est prise en compte en ajoutant le terme non hermitien \mathcal{L}_{sp} dans l'équation précédente :

$$\mathcal{L}_{\text{sp}} = -i\hbar\Gamma_0 \begin{pmatrix} \rho_{ee} & \rho_{eg}/2 \\ \rho_{ge}/2 & -\rho_{ee} \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

où Γ_0 est la largeur naturelle (dans la situation présente $\Gamma_0 \approx 143 \text{ s}^{-1}$) de la transition optique. L'équation d'évolution de l'opérateur densité devient :

$$i\hbar \dot{\rho} = [H, \rho] + \mathcal{L}_{\text{sp}} \quad (2.55)$$

Pour résoudre ce système, il est nécessaire d'effectuer une dernière approximation, nommée RWA pour "Rotating Wave Approximation". Celle-ci consiste à passer en représentation d'interaction par l'utilisation de la transformation unitaire $U = \exp(iH_0 t/\hbar)$, et à négliger les termes en $\exp[i(\omega_L + \omega_0)t]$ qui oscillent très vite, devant ceux en $\exp[i(\omega_L - \omega_0)t]$. Cela nécessite de se trouver dans une situation telle que $|\delta_L| = |\omega_L - \omega_0| \ll \omega_L + \omega_0$, soit encore $\delta_L/\omega_0 \ll 2$. Cette contrainte est vérifiée puisque nous aurons affaire à des désaccords δ_L de l'ordre de quelques largeurs naturelles Γ_0 au plus. Or, nous avons $\Gamma_0/\omega_0 \approx 3 \cdot 10^{-8}$, ce qui nous place de façon très satisfaisante dans le cadre de cette approximation.

On obtient alors un système d'équations différentielles couplées du premier ordre, appelées équations de Bloch optiques (OBE). Il est possible d'obtenir l'évolution temporelle des solutions par intégration numérique des équations de Bloch optiques pour un ensemble de paramètres et de conditions initiales données. Prenons le cas d'un ensemble d'atomes se trouvant à l'instant initial dans leur état fondamental $|g\rangle$. Concernant les termes de population, la forme des solutions dépendant du temps est caractérisée par deux domaines temporels. Un premier domaine caractéristique d'un régime transitoire succédant directement à l'application du champ laser, qui amène progressivement les termes de population dans un régime stationnaire qui constitue le second domaine temporel. Pour ce régime stationnaire des populations, il est possible d'obtenir une forme analytique de la solution. Celle-ci est donnée par :

$$\rho_{ee}^{\text{st}} = \frac{1}{2} \frac{\Omega_L^2/2}{(\omega_L - \omega_0)^2 + \Omega_L^2/2 + (\Gamma_0/2)^2} \quad (2.56)$$

et représente la probabilité de trouver un atome dans l'état excité à un instant suffisamment éloigné du début de l'application du champ laser (typiquement quelques périodes Rabi).

Pour obtenir cette solution nous avons considéré l'atome au repos. Or, pour un atome en mouvement, il faut tenir compte de sa vitesse lors de la résolution des OBE. Cependant, si la dynamique interne est beaucoup plus rapide que la dynamique externe, il est possible d'approximer l'effet de la vitesse sur les solutions des OBE, par son effet sur le désaccord laser δ_L au travers de l'effet Doppler-Fizeau, directement dans la solution stationnaire.

L'effet Doppler-Fizeau traduit la variation de fréquence d'un champ électromagnétique en fonction de l'état de mouvement de la source et du récepteur. Dans la situation qui nous concerne, la source laser est fixe dans le référentiel du laboratoire et l'atome récepteur est en mouvement dans le piège. Du point de vue du référentiel du laboratoire, considérons l'absorption d'un photon du champ laser d'impulsion $\vec{P}_L = \hbar\vec{k}_L$ par un atome d'impulsion $\vec{P} = m\vec{v}$, non relativiste, se trouvant dans l'état fondamental d'énergie E_g . Le photon absorbé, l'atome est maintenant dans l'état d'énergie E_e et son impulsion est devenue $\vec{P}_2 = m\vec{v}_2$. Les lois de conservation de l'impulsion et de l'énergie donnent :

$$m\vec{v} + \hbar\vec{k}_L = m\vec{v}_2 \quad (2.57)$$

$$E_g + \frac{m\vec{v}^2}{2} + \hbar\omega_L = E_e + \frac{m\vec{v}_2^2}{2} \quad (2.58)$$

L'absorption du photon s'effectue de l'état $|g\rangle$ vers l'état $|e\rangle$. Éliminant \vec{v}_2 des équations précédentes, nous obtenons la pulsation ω_L que doit posséder le photon de l'onde laser pour réaliser une interaction à résonance :

$$\hbar \omega_L = \hbar \omega_0 + \hbar \vec{k}_L \cdot \vec{v} + \frac{\hbar^2 \vec{k}_L^2}{2m} \quad (2.59)$$

où le dernier terme du membre de droite correspond à l'énergie de recul de l'atome, qui peut être négligée en première approximation. Dans le référentiel du laboratoire, la fréquence apparente de la transition, $\tilde{\omega}_0$, est donc décalée à la valeur $\tilde{\omega}_0 = \omega_0 + \vec{k}_L \cdot \vec{v}$. Le terme $\vec{k}_L \cdot \vec{v}$ est le premier ordre du décalage en fréquence dû à l'effet Doppler. Il s'en suit que, pour un atome de vitesse \vec{v} , la probabilité d'être dans l'état excité dans le régime stationnaire est donnée par :

$$\rho_{ee}(\vec{v})_{\text{st}} = \frac{1}{2} \frac{\Omega_L^2/2}{(\omega_L - \tilde{\omega}_0)^2 + \Omega_L^2/2 + (\Gamma_0/2)^2} = \frac{1}{2} \frac{\Omega_L^2/2}{(\delta_L - \vec{k}_L \cdot \vec{v})^2 + \Omega_L^2/2 + (\Gamma_0/2)^2} \quad (2.60)$$

où $\delta_L = \omega_L - \omega_0$ est le désaccord du laser à la fréquence de résonance.

Cette approximation est correcte uniquement si la variation de vitesse associée à la dynamique externe n'affecte pas de façon significative la dynamique interne de l'atome, décrite par les équations de Bloch optiques. Cette condition de validité, appelée condition de raie large [78], est en général donnée sous la forme :

$$\frac{\hbar^2 k_L^2}{2m} \ll \hbar \Gamma_0 \quad \text{or} \quad \frac{\hbar^2 k_L^2/2m}{\hbar \Gamma_0} \approx 1,3 \cdot 10^{-3} \ll 1 \quad (2.61)$$

traduisant l'idée que l'énergie cinétique de recul lors d'une transition doit rester très inférieure à l'énergie nécessaire pour sortir la fréquence du laser en dehors de la largeur naturelle de la raie.

Lorsque l'atome n'est pas libre mais subit des forces, il faut s'assurer que cette condition est toujours vérifiée. Or, nous avons vu (cf. section 1.2) qu'en piège rf quadrupolaire, le mouvement de l'ion dans l'approximation adiabatique est donné par l'équation (1.41). Selon la direction x , la vitesse qui en dérive est alors :

$$v_x(t) = \dot{R}_x(t) \left[1 - \frac{q_x}{2} \cos(\Omega t) \right] + \frac{q_x \Omega}{2} R_x(t) \sin(\Omega t) \quad (2.62)$$

$$\text{avec } R_x(t) = x_0 \cos(\omega_x t) \quad (2.63)$$

où Ω est la pulsation rf, q_x le paramètre des équations de Mathieu et x_0 l'amplitude maximale du macro-mouvement de l'ion (cf. section 1.1.2). Le terme \dot{R}_x correspond à la vitesse du macro-mouvement de l'ion dans le pseudo-potential de fréquence caractéristique ω_x , elle-même proportionnelle à $q_x \Omega$. Parmi les deux autres termes induits par le forçage rf, celui d'ordre dominant en q_x est le terme se comportant en $\sin(\Omega t)$. Il faut s'assurer que ce terme ne connaît pas de variation significative sur le temps caractéristique de l'interaction laser-atome. Celui-ci est de l'ordre de la période de Rabi. La variation maximale du sinus se situe autour de $t = n\pi/\Omega$. Nous calculons donc la variation d'impulsion induite par le dernier terme de l'équation précédente, sur un intervalle de temps de $2\pi/\Omega_L$ centré autour de $t = n\pi/\Omega$:

$$\Delta \vec{P} = \frac{\pi m q_x \Omega^2}{\Omega_L} x_0 \quad (2.64)$$

$$\Rightarrow \frac{\|\Delta \vec{P}\|^2}{2m} = \frac{\pi^2 m q_x^2 \Omega^4}{2\Omega_L^2} x_0^2 \quad (2.65)$$

Pour une fréquence de piégeage $\Omega/2\pi = 10$ MHz et une pulsation de Rabi $\Omega_L = \Gamma_0$, obtient la contrainte :

$$q_x^2 x_0^2 \ll \frac{\Omega_L^2}{\Omega^4} \frac{2\hbar\Gamma_0}{\pi^2 m} = 8,9 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}^2 \quad (2.66)$$

Bien que cette estimation soit grossière, et considère la configuration dans laquelle le faisceau laser perçoit le changement de vitesse de façon maximale, elle impose une limite sévère sur le domaine d'application du modèle lorsque l'on considère un potentiel radio-fréquence.

2.3.3 Implémentation de l'interaction

Différentes modélisations du refroidissement Doppler peuvent se trouver dans la littérature. La plus commune est de modéliser le refroidissement Doppler obtenu avec deux faisceaux lasers colinéaires et contra-propageant, par une force de viscosité $\vec{F} = -\alpha_L \vec{v}$ agissant sur les ions [29, 79, 80]. En l'absence de toute autre force extérieure, la température converge vers la limite Doppler, un terme de chauffage est alors rajouté pour empêcher la température de décroître indéfiniment. Cette modélisation a l'avantage de la simplicité et d'être peu gourmande en temps de calcul. Son domaine d'application est cependant limité. Nous développerons ce modèle plus en détail dans la partie suivante, dans le but de vérifier la cohérence des résultats obtenus grâce à notre modélisation. Une autre modélisation, possédant un degré de finesse supplémentaire, se trouve dans [81]. Dans celle-ci, une force proportionnelle au taux de diffusion $R(\vec{x}, \vec{v})$ des photons par les atomes agit à chaque instant et modélise l'absorption des photons par l'atome. Les photons émis de façon spontanée selon des directions aléatoires, dont le nombre est égal à l'intégrale du taux R sur la période rf, sont ensuite pris en compte par l'ajout d'une force n'agissant qu'à un unique instant à la fin de la période rf. Une dernière méthode numérique porte le nom de MCWF [82], pour Monte-Carlo Wave-Function, et permet une modélisation différente de l'interaction laser-atome. Elle offre une approche du type fonction d'onde pour les systèmes dissipatifs. Cela a l'avantage d'être moins coûteux en temps de calcul que la résolution des équations de Bloch optiques lors de l'utilisation de la matrice densité. Cette méthode n'est pas directement applicable à la dynamique moléculaire, et le développement donné dans [82] ne prend pas en compte la dynamique externe des ions. Elle se rapproche néanmoins de la solution que nous avons choisie pour implémenter le refroidissement Doppler dans le programme, par la façon stochastique dont sont traités les phénomènes d'absorption et d'émission spontanée.

L'implémentation que nous avons adoptée est issue de l'interprétation corpusculaire de l'interaction laser-atome. Nous modélisons l'effet de cette interaction par le phénomène de recul que subit un atome lorsqu'il absorbe ou émet un photon. Cela se traduit par un saut instantané dans l'espace de l'impulsion de l'atome. Dans cette version, nous considérons un champ laser parfaitement monochromatique et d'intensité uniforme sur l'ensemble du volume d'interaction laser-atomes. Cette approximation n'est pas indispensable au fonctionnement de l'algorithme et peut aisément être modifiée en changeant la constante Ω_L en une fonction de \vec{r} ayant un profil gaussien par exemple. Les déplacements des raies liés à l'effet Stark provenant du champ électrique de confinement et des atomes ionisés voisins sont aussi négligés.

Le sous-programme du refroidissement Doppler est appelé à chaque pas de temps dt de la simulation et s'occupe des atomes indépendamment les uns des autres. Cela rend possible la parallélisation de l'algorithme. A chaque atome est associée une variable caractérisant son état, fondamental ou excité, et un test effectué en début du sous-programme sur cette variable permet d'agir en conséquence. Un générateur de nombres aléatoires, de loi uniforme

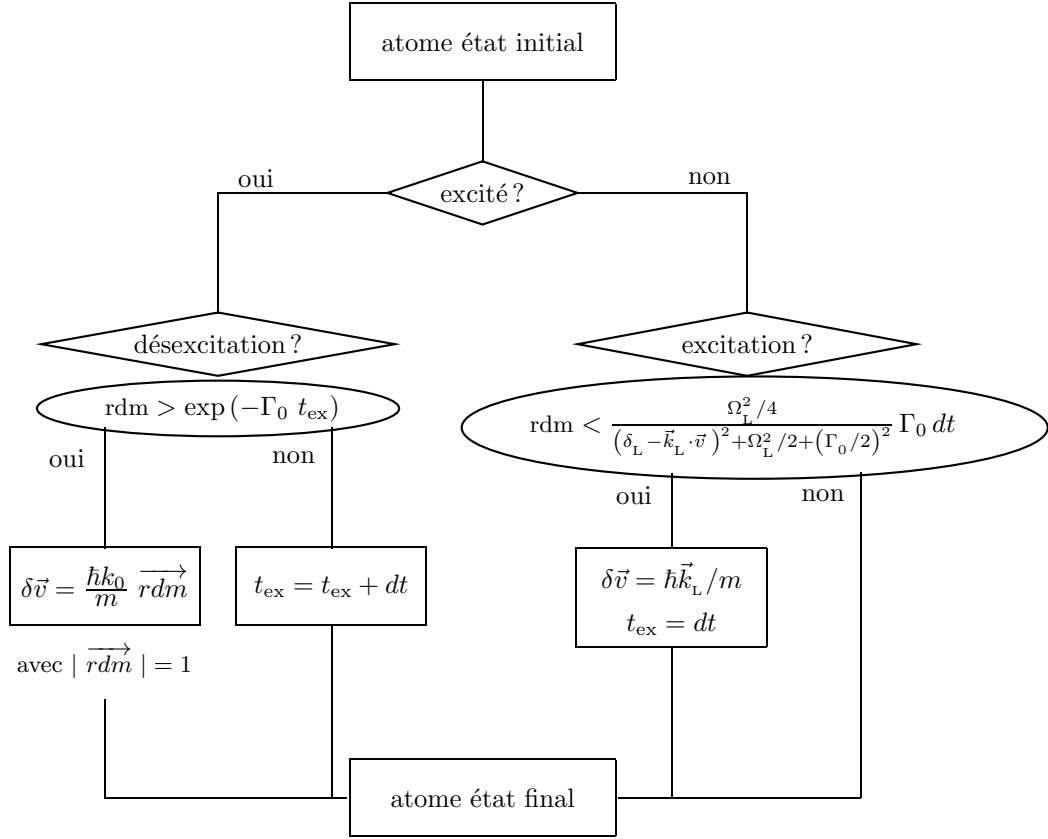


Figure 2.2 – Organigramme du sous-programme modélisant le refroidissement Doppler.

sur l'intervalle $[0, 1]$, génère le nombre **rdm**.

Si l'atome est trouvé dans son état fondamental, ce nombre est comparé à la probabilité d'excitation de l'atome sur l'intervalle de temps dt . Nous supposons que le régime stationnaire de l'interaction laser-atome est atteint. Dans ces conditions, le taux d'excitation est égal au taux de désexcitation, ce dernier étant la somme du taux de désexcitation par émission spontanée R_{sp} , et de désexcitation par émission stimulée R_{st} . Or, lors d'une désexcitation par émission stimulée, l'impulsion acquise par l'atome lors de l'absorption du photon est restituée à l'onde laser, résultant en un effet nul sur l'impulsion de la particule. Nous ne prenons donc en compte que le taux de désexcitation spontanée. Ainsi, la probabilité d'excitation d'un atome pendant l'intervalle de temps dt est donné par :

$$P_e(\vec{v}, dt) = \Gamma_0 \rho_{ee}(\vec{v}) dt \quad (2.67)$$

où $\rho_{ee}(\vec{v})$ est donnée en équation (2.60). Si **rdm** est supérieur à $P_e(\vec{v})$, l'atome reste dans son état fondamental, cela n'a aucune conséquence sur cet atome et le sous-programme s'occupe alors de l'atome suivant. Si au contraire **rdm** $<$ $P_e(\vec{v})$, il y a excitation de l'atome : la variable d'état est changée à "excité" et la vitesse \vec{v} de l'atome est instantanément changée en $\vec{v} + \hbar\vec{k}_L/m$ modélisant l'absorption du photon. Un compteur **t_{ex}**, propre à chaque atome et calculant le temps passé dans l'état excité, est initialisé à la valeur du pas de temps d'intégration dt .

Si, au contraire, l'atome est trouvé dans l'état excité au début du sous-programme, le nombre \mathbf{rdm} est utilisé pour effectuer un test de désexcitation. La loi de probabilité utilisée est une loi de type décroissance exponentielle $\propto \exp(-\Gamma_0 \mathbf{t}_{\text{ex}})$, où la constante de temps est donnée par la largeur naturelle de la raie. Si \mathbf{rdm} est inférieur à $\exp(-\Gamma_0 \mathbf{t}_{\text{ex}})$ l'atome reste dans l'état excité et le temps \mathbf{t}_{ex} est incrémenté de la durée d'un pas de temps dt . En revanche, si $\mathbf{rdm} > \exp(-\Gamma_0 \mathbf{t}_{\text{ex}})$, alors l'atome retourne dans l'état fondamental et sa vitesse \vec{v} est instantanément changée en :

$$\vec{v} + \frac{\hbar\omega_0}{mc} \overrightarrow{\mathbf{rdm}}(\theta, \phi), \quad \text{avec } \|\overrightarrow{\mathbf{rdm}}(\theta, \phi)\| = 1 \quad (2.68)$$

où $\overrightarrow{\mathbf{rdm}}(\theta, \phi)$ est un vecteur unitaire de direction aléatoire suivant une loi de distribution uniforme sur la sphère, représentant la direction opposée à celle du photon émis.

Sous cette forme, la loi de probabilité de désexcitation spontanée n'est pas markovienne, et n'est donc pas correcte. La condition permettant la désexcitation a été remplacée, a posteriori, par $\mathbf{rdm} < \exp(-\Gamma_0 dt)$. Les tests présentés dans la section suivante ont été réalisés en utilisant la loi non markovienne. Ces mêmes tests ont été refaits avec le nouvel algorithme et un accord identique a été obtenu.

Dans cette modélisation, nous avons négligé la variation de la longueur d'onde du photon émis due à l'effet Doppler. La variation relative est donnée par :

$$\frac{|\delta k|}{k_0} = \frac{|\delta\omega|}{ck_0} = \frac{|\vec{k}_0 \cdot \vec{v}|}{ck_0} \leq \frac{v}{c} \quad (2.69)$$

Nous considérons la vitesse des ions égale à la vitesse quadratique moyenne $v = \sqrt{3k_B T/m}$. Pour un atome de calcium de température $T = 1000$ K, on obtient $\delta k/k_0 < 2,6 \cdot 10^{-6}$, confirmant que la variation du vecteur d'onde peut être négligée.

Les étapes successives de l'algorithme sont récapitulées sur l'organigramme de la figure 2.2.

Refroidissement par plusieurs lasers

Nous souhaitons pouvoir simuler l'interaction avec au moins trois lasers fonctionnant simultanément, de façon à pouvoir les répartir sur chaque direction de l'espace si nécessaire. Pour cela, nous nous plaçons dans le régime linéaire. Celui-ci correspond au domaine des faibles intensités ($\Omega_L^2 \ll \Gamma_0^2$) et permet de traiter la réponse de chaque laser de façon indépendante, en négligeant les éventualités telles qu'un atome puisse être excité par un laser et se désexciter de façon stimulée par un autre laser. Cela permet aussi de sommer les probabilités d'excitation de chaque laser.

L'action de chaque laser étant considérée indépendante, nous devons déterminer une façon correcte de gérer les priorités lors du processus d'excitation. Deux procédures apparaissent de façon logique. La première consiste à calculer la probabilité d'excitation de l'atome par chacun des lasers. Le laser correspondant à la plus grande probabilité d'excitation effectue le test d'excitation en premier, et ainsi de suite, les tests s'effectuant par valeur décroissante de la probabilité. Cette méthode semble biaisée car elle favorise les excitations par le laser se trouvant le plus à résonance, c'est-à-dire celui permettant la plus grande décélération ou la plus faible accélération. De plus, cette méthode a le désavantage d'effectuer les calculs de probabilités de tous les lasers, quel que soit le résultat des tests.

Une autre façon de procéder est de laisser les priorités s'effectuer au hasard. De ce fait, on ne doit calculer la probabilité d'excitation que lorsque le test d'excitation du laser précédent a

échoué, mais cela requiert l'appel au générateur de nombres aléatoires consommant du temps de calcul.

Les tests effectués, identiques à celui détaillé dans la section suivante, penchent de façon claire en faveur de la seconde solution, pour laquelle la priorité s'effectue de façon aléatoire. C'est donc cette implémentation que nous utilisons dans la suite.

2.3.4 Validation de la modélisation

Valider une modélisation est l'étape la plus importante dans l'élaboration d'un programme informatique. En effet, bon ou mauvais, l'exécution d'un algorithme mène toujours à un résultat. A notre charge de vérifier sa cohérence et, si possible, d'estimer l'erreur commise. Dans le but de valider notre implémentation de l'interaction laser, nous nous plaçons dans le cadre de plusieurs approximations qui permettent de développer un modèle analytique soluble de l'interaction laser-atome : le modèle de la force de viscosité. Nous pourrions ainsi vérifier l'accord du résultat numérique avec ce que prédit le modèle analytique.

Sous certaines conditions, l'action de deux faisceaux laser contra-propageant interagissant avec un atome produit un effet moyen comparable à une force de viscosité, appelée mélasse optique. Le développement complet de cette approximation peut être trouvé dans la publication de P.D. Lett *et al.* [57], de laquelle nous reportons ici les résultats qui nous sont nécessaires.

Lorsqu'un faisceau laser de vecteur d'onde \vec{k}_L interagit avec un atome, ce dernier est soumis à une succession de cycles d'absorption puis d'émission de photons. Ainsi que nous l'avons expliqué en introduction, chaque photon absorbé par l'atome change son impulsion de la quantité $(\Delta p)_{\text{ex}} = \hbar \vec{k}_L$, alors que les photons émis par désexcitation spontanée, du fait du caractère isotrope du phénomène, n'affectent pas (en moyenne) l'impulsion de l'atome et $(\overline{\Delta p})_{\text{sp}} = 0$ (les photons d'émission stimulée sont pris en compte dans le phénomène de saturation de l'absorption). Ainsi, l'effet moyen résulte en une force \vec{F}_L , proportionnelle à l'impulsion transférée par chaque photon absorbé, $\hbar \vec{k}_L$, et au nombre d'émissions spontanées par unité de temps, R_{sp} , telle que :

$$\vec{F}_L = \hbar \vec{k}_L R_{\text{sp}} = \hbar \vec{k} \frac{\Gamma_0}{2} \frac{\Omega_L^2/2}{\left(\delta_L - \vec{k}_L \cdot \vec{v}\right)^2 + \Omega_L^2/2 + (\Gamma_0/2)^2} \quad (2.70)$$

Si deux lasers sont colinéaires et contra-propageants, la force totale résultante dans la limite des faibles intensités ($\Omega_L \ll \Gamma_0/\sqrt{2}$) est donnée par la somme de leur force moyenne respective. Lorsque le désaccord Doppler est tel que $|k_L v| \ll \Gamma_0$ et $|k_L v| \ll |\delta_L|$, la force totale se met sous la forme :

$$\vec{F}_{\text{tot}} = \delta_L \hbar k \Gamma_0 \frac{\Omega_L^2}{[(\Gamma_0/2)^2 + \delta_L^2]^2} k \vec{v}_{//} = -\alpha_L \vec{v}_{//} \quad (2.71)$$

où $\vec{v}_{//}$ est la projection de la vitesse de l'atome sur l'axe de propagation des faisceaux laser. Dans la suite, nous réduisons l'espace à l'unique direction de propagation des lasers. Ainsi, la variation d'énergie cinétique induite par cette force moyenne à chaque instant est donnée par :

$$\left(\frac{dE_c}{dt}\right)_{\text{cool}} = \vec{F}_{\text{tot}} \cdot \vec{v}_{//} = -\alpha_L v_{//}^2 \quad (2.72)$$

Cette perte d'énergie résulte uniquement de l'effet moyen de l'absorption des photons par les atomes, autrement dit des excitations, puisque l'effet de l'émission spontanée se moyenne à

zéro. Cependant, si l'effet de l'émission spontanée résulte en un effet moyen nul sur l'impulsion, $(\overline{\Delta p})_{\text{sp}} = 0$, il n'en est pas de même sur le carré de cette dernière pour laquelle on peut montrer que chaque cycle d'absorption-émission de photon produit une variance sur l'impulsion qui, dans le cas unidimensionnel, est égale à :

$$(\overline{\Delta p^2})_{\text{sp}} = 2\hbar^2 k^2, \quad (2.73)$$

où le facteur 2 rend compte du fait que lors d'un cycle, la variation de l'impulsion est due à un phénomène d'absorption et un phénomène d'émission spontanée. La variation d'énergie cinétique par unité de temps qui en dérive, β_{heat} , est proportionnelle à cette variance et au taux d'émission spontanée. Dans le régime stationnaire et dans le cadre des approximations précédentes, le taux d'émission spontanée est le double de celui obtenu avec un unique laser, soit $2R_{\text{ex}}$, où R_{ex} est défini par l'équation (2.70), on obtient alors :

$$\beta_{\text{heat}} = \left(\frac{dE_c}{dt} \right)_{\text{heat}} = \frac{1}{2m} (\overline{\Delta p^2})_{\text{sp}} 2R_{\text{ex}} = \frac{\hbar^2 k^2}{m} \frac{\Gamma_0}{2} \frac{\Omega_L^2}{(\Gamma_0/2)^2 + \delta_L^2} \quad (2.74)$$

La variation de l'énergie cinétique au cours du temps est alors donnée par :

$$\left(\frac{dE_c}{dt} \right) = \left(\frac{dE_c}{dt} \right)_{\text{cool}} + \left(\frac{dE_c}{dt} \right)_{\text{heat}} \quad (2.75)$$

dont la résolution conduit à une solution analytique de l'évolution de la température :

$$T(t) = T_i \exp\left(-\frac{2\alpha}{m} t\right) + T_{\text{st}} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\alpha}{m} t\right) \right] \quad (2.76)$$

$$\text{avec, } T_{\text{st}} = \frac{m \beta_{\text{heat}}}{k_B \alpha} = -\frac{\hbar}{2k_B \delta_L} [(\Gamma_0/2)^2 + \delta_L^2] \quad (2.77)$$

où T_i et T_{st} sont respectivement la température initiale et la température limite stationnaire. On déduit de cette dernière la plus basse température accessible, atteinte pour un désaccord laser $\delta_L = -\Gamma_0/2$, et nommée température Doppler T_D :

$$T_D = \frac{\hbar \Gamma_0}{2k_B} \quad (2.78)$$

Le modèle établi, nous procédons au test de l'algorithme. Il consiste à simuler de façon unidimensionnelle, un gaz parfait dans une mélasse optique. La restriction sur la dimension permet d'utiliser de façon immédiate les résultats précédents et l'hypothèse du gaz parfait signifie que nous ne prenons en compte ni interactions entre particules, ni confinement. Les valeurs numériques utilisées dans le programme sont approximées à $\Gamma_0 = 143 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ et $\lambda_0 = 397 \text{ nm}$. Avec ces valeurs, la température limite Doppler attendue est $T_D \approx 0,546 \text{ mK}$. Le pas de temps de la simulation est pris à $dt = \Gamma_0^{-1}/10 = 0,7 \text{ ns}$. Nous nous plaçons dans le domaine des approximations précédentes :

$$\Omega_L \ll \Gamma_0/\sqrt{2} \quad (2.79)$$

$$|k_L v| \ll |\delta_L| = \frac{\Gamma_0}{2} \quad \Leftrightarrow \quad T \ll 32 \text{ mK} \quad (2.80)$$

Ainsi, la puissance de chaque laser est choisie telle que $\Omega_L = 0,1 \Gamma_0/\sqrt{2}$. Nous simulons un ensemble de 10000 particules dont les vitesses initiales correspondent à une distribution thermique de température $T_i = 1 \text{ mK}$. Nous choisissons un désaccord laser fixe, $\delta_L = -\Gamma_0/2$. Dans

ces conditions, la valeur théorique du coefficient de viscosité est $\alpha_{\text{Lth}} = 2,64 \cdot 10^{-22} \text{ kg.s}^{-1}$, et la température stationnaire attendue est la température Doppler $T_{\text{st th}} = T_D$. Le résultat obtenu est donné en figure 2.3, sur laquelle est tracée l'évolution de la température du gaz parfait. Le fit de cette courbe est ensuite réalisé avec la fonction donnée en équation (2.76). Les paramètres obtenus sont :

$$\alpha_{\text{num}} = 2,72 \cdot 10^{-22} \text{ kg.s}^{-1} \quad \text{et} \quad T_{\text{st num}} = 0,548 \text{ mK} \quad (2.81)$$

soit une erreur relative de l'ordre de 3% sur le coefficient de viscosité α , et inférieure à 0,4% sur la température stationnaire. Bien que cette modélisation de l'émission spontanée ne soit pas Markovienne, elle constitue un très bon accord avec les prévisions théoriques du modèle de la mélasse optique 1D. Ce test valide l'implémentation du refroidissement Doppler pour les faibles

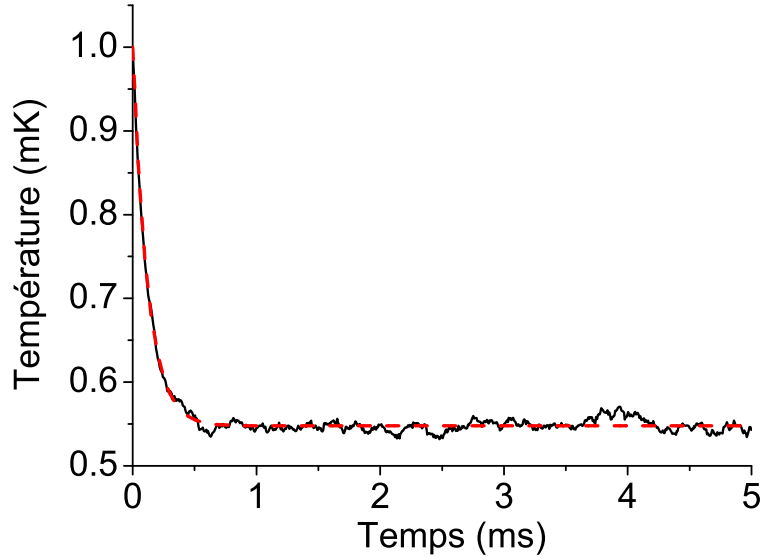


Figure 2.3 – Température d'un gaz parfait de 10000 particules dans une mélasse optique 1D. La ligne en pointillés rouges est le résultat du fit de la courbe de température.

intensités et faibles vitesses. Il sera cependant faux dans le domaine des hautes intensités pour lequel les approximations précédemment effectuées ne sont plus valables. La figure 2.4 montre le comportement du taux d'excitation par atome sur un domaine de Ω_L s'étendant au delà de l'applicabilité de l'algorithme. Nous voyons qu'à saturation de la transition, le taux dépasse la limite de $\Gamma_0/2$. Ceci est dû au traitement des priorités lors des tests d'excitation, qui considère chaque laser de façon indépendante. L'algorithme induit une convergence vers $3\Gamma_0/4$. Cette limite n'est pas atteinte sur la figure car le test a été réalisé avec un pas de temps $dt = 10^{-9} \text{ s}$, ce qui diminue le nombre d'excitations effectives (voir remarques sur l'implémentation ci-après). Lorsqu'un seul laser est utilisé, la limite tend effectivement vers $\Gamma_0/2$ pour un pas de temps suffisamment petit.

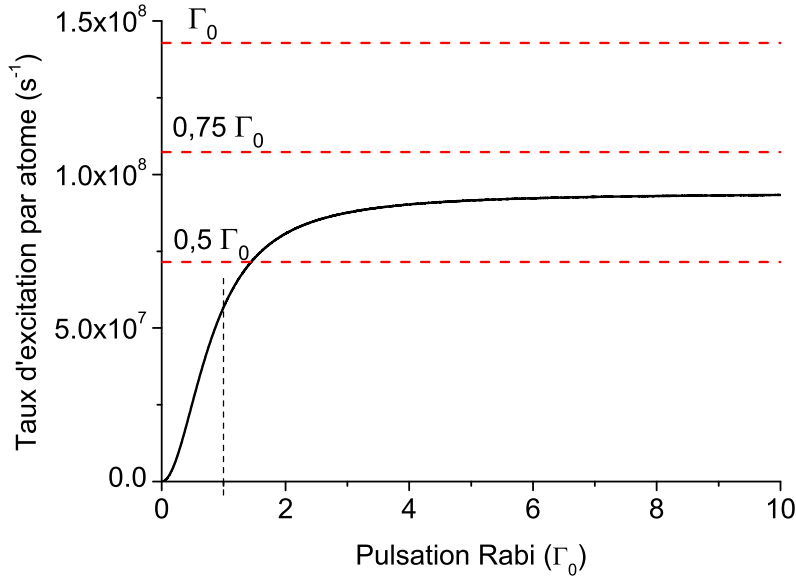


Figure 2.4 – Taux d'excitation par atome en fonction de la pulsation de Rabi Ω_L , simulé pour un gaz parfait 1D sous l'action de deux lasers contra-propageant. A saturation de la transition, l'algorithme converge vers un taux supérieur à la valeur théorique $\Gamma_0/2$.

Remarque sur l'implémentation

Nous devons être vigilants sur le fait que pour modéliser le recul de l'atome, nous sommes des quantités de grandeurs qui peuvent être très différentes. Cela ne pose pas de problème dans un calcul analytique, mais il n'en est pas de même dans le numérique où nous pouvons nous heurter au epsilon machine ε_m . Par définition, ε_m est le plus grand réel tel que $1 + \varepsilon_m = 1$. La commande du langage ForTran retournant la valeur de l'epsilon machine est `epsilon(v)` où `v` est une variable donnant le type (entier ou réel), ainsi que le codage (nombre de bits), à retourner. La machine sur laquelle les calculs sont effectués retourne la valeur $\approx 2,22 \cdot 10^{-16}$ pour le type réel en double précision (64 bits) avec lequel nous travaillons. Ainsi, pour que l'effet soit correctement pris en compte, le rapport de la vitesse de recul de l'atome dû au photon sur la vitesse de l'atome, ε_R , doit être très supérieur à cette valeur :

$$\frac{v + \hbar k_0/m}{v} = 1 + \varepsilon_R \quad \text{avec} \quad \varepsilon_R \gg \varepsilon_m \quad (2.82)$$

Or, la vitesse de recul d'un atome lors de l'absorption d'un photon est $\hbar k_0/m \approx 2,51 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$. Pour que l'effet soit correctement pris en compte, la composante de la vitesse de l'atome dans l'axe du laser doit être telle que :

$$v \ll \frac{2,51 \cdot 10^{-2}}{2,22 \cdot 10^{-16}} \approx 10^{14} \text{ m.s}^{-1}, \quad (2.83)$$

qui est de plusieurs ordres de grandeurs supérieure à la vitesse de la lumière dans le vide.

Une seconde problématique concerne le choix du pas de temps dt . Celui-ci doit être suffisamment petit pour que l'éventualité d'un atome subissant deux excitations pendant le même pas de temps soit proche de zéro. Or, le taux d'excitation saturant à $\Gamma_0/2$ avec l'augmentation

de l'intensité laser, cela se traduit par $dt \ll 2\Gamma_0^{-1}$. Le test précédent donne des résultats très satisfaisant pour $dt = \Gamma_0^{-1}/10 = 0,7$ ns. Par la suite, nous emploierons souvent un pas de temps supérieur à cette valeur, égal à $dt = 1$ ns. Reproduisant le test précédent pour les mêmes paramètres, on obtient pour cette valeur du pas de temps une erreur relative $\delta\alpha/\alpha = -3,4\%$, traduisant le fait que des interactions non réalisées induisent un taux de refroidissement inférieur à ce qu'il devrait être. Cependant, en valeur absolue, cette erreur n'est pas supérieure à celle obtenue avec le pas de temps précédent. L'erreur relative sur la température stationnaire, quand à elle, augmente à $\delta T_{\text{st}}/T_{\text{st}} \approx 0,7\%$, correspondant à $T_{\text{st num}} = 0,550$ mK, ce qui demeure une erreur acceptable.

2.4 Mesure de la température

Dans cette section, nous explicitons l'algorithme utilisé pour la mesure de la température des ions. En piège radio-fréquence, le champ électrique rf est à l'origine d'un mouvement forcé des particules, appelé micro-mouvement (cf. 1.2). Il a été montré au moyen de simulations de dynamique moléculaire, originellement par J.D. Prestage *et al.* [28] en piège de Paul, puis par J.P. Schiffer *et al.* [83] en piège linéaire, que la soustraction de l'énergie cinétique associée au micro-mouvement des ions, lors du calcul de la température, permet de définir une température effective en accord avec les prédictions obtenues de modèles utilisant des champs statiques. La température effective ainsi définie prend uniquement en compte la contribution du macro-mouvement à l'énergie cinétique des particules. La contribution du micro-mouvement peut être vue comme non-thermique, puisqu'elle n'est pas liée à un mouvement microscopique désordonné (chaos moléculaire) des particules.

La soustraction de la contribution non-thermique s'effectue en calculant la vitesse moyenne de chaque ion sur un intervalle de temps correspondant à une période rf. Dans les publications [28] et [83], cette vitesse moyenne, que nous appelons vitesse thermique et notons \vec{v}_{th} , est calculée de façon complexe et à chaque pas de temps, à partir de la différence des positions moyennes (moyennées sur les précédents pas de temps totalisant une période rf) de chaque ion, prises à un pas de temps d'intervalle. Cet algorithme est détaillé dans l'article [28].

La mesure de température que nous avons choisie d'implémenter dans le programme est différente de la précédente car la vitesse thermique est obtenue par une moyenne directe de la vitesse de la particule sur une période rf. De façon générale, toute grandeur dite "thermique" sera calculée ainsi, au moyen de cet algorithme.

2.4.1 Température en piège radio-fréquence

Pour un système de particules ponctuelles sans degrés de liberté internes, la température se réduit à une moyenne sur le nombre de particules, et par degré de liberté, de l'énergie cinétique de mouvements désordonnés.

$$\frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2N_p} \sum_{i=1}^{N_p} m_i (v_{x\ i}^2 + v_{y\ i}^2 + v_{z\ i}^2) = \frac{1}{2N_p} \sum_{i=1}^{N_p} m_i \|\vec{v}_i\|^2 = \frac{1}{2} \langle m \|\vec{v}\|^2 \rangle \quad (2.84)$$

où la dernière égalité définit la notation utilisée pour représenter les moyennes sur le nombre de particules. Ainsi nous pouvons définir une température sur chaque degré de liberté du système :

$$\frac{1}{2} k_B T_x = \frac{1}{2} \langle m v_x^2 \rangle \quad (2.85)$$

Si le système n'est pas au repos par rapport au référentiel dans lequel on effectue la mesure, l'énergie cinétique du mouvement global du système doit être retranchée à l'énergie cinétique mesurée :

$$\frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} \{ \langle m \|\vec{v}\|^2 \rangle - \|\langle m \vec{v} \rangle\|^2 / \langle m \rangle \} \quad (2.86)$$

Cela équivaut à retrancher l'énergie provenant du mouvement du centre de masse (c.m.) du système. Dans cette partie, nous utilisons les notations suivantes :

- \vec{x}_i (\vec{v}_i) est la position (vitesse) de la particule i par rapport à l'origine du piège.
- \vec{x}_{CM} (\vec{v}_{CM}) est la position (vitesse) du centre de masse du système par rapport à l'origine du piège.

– \vec{X}_i (\vec{V}_i) est la position (vitesse) de la particule i relativement au centre de masse. Avec ces notations, nous avons donc :

$$\vec{x}_i = \vec{x}_{CM} + \vec{X}_i \quad (2.87)$$

$$\vec{v}_i = \vec{v}_{CM} + \vec{V}_i \quad (2.88)$$

où

$$\vec{x}_{CM} = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} m_i \vec{x}_i}{\sum_{j=1}^{N_p} m_j} = \frac{\langle m \vec{x} \rangle}{\langle m \rangle} \quad \text{et} \quad \vec{v}_{CM} = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} m_i \vec{v}_i}{\sum_{j=1}^{N_p} m_j} = \frac{\langle m \vec{v} \rangle}{\langle m \rangle} \quad (2.89)$$

Nous reformulons la température à l'aide de ces nouvelles notations :

$$\langle m \vec{v} \rangle = \langle m \rangle \vec{v}_{CM} \quad (2.90)$$

$$\langle m \|\vec{v}\|^2 \rangle = \langle m \rangle \|\vec{v}_{CM}\|^2 + \langle m \|\vec{V}\|^2 \rangle \quad (2.91)$$

car, par définition du centre de masse : $\langle m \vec{V} \rangle = \vec{0}$. Nous pouvons alors écrire la température en fonction des coordonnées dans le référentiel du centre de masse :

$$\frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} \{ \langle m \|\vec{v}\|^2 \rangle - \|\langle m \vec{v} \rangle\|^2 / \langle m \rangle \} = \frac{1}{2} \langle m \|\vec{V}\|^2 \rangle \quad (2.92)$$

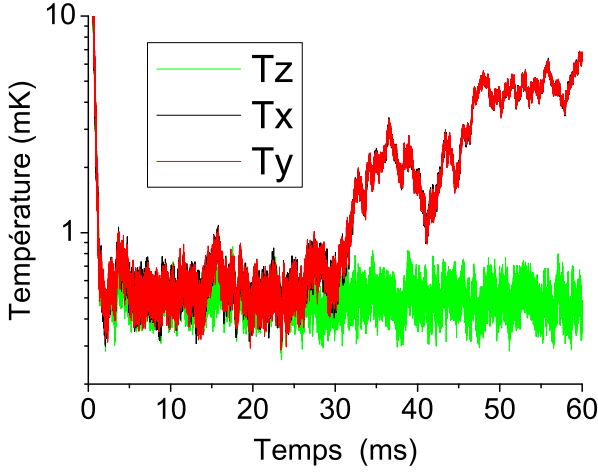
La définition précédente de la température se résume à une moyenne sur le nombre de particules, et par degré de liberté, de l'énergie cinétique dans le référentiel du centre de masse, sous la condition implicite que les mouvements soient désordonnés par nature ou thermiques. Il faut alors s'affranchir de tous les mouvements non thermiques pouvant survenir dans ce référentiel. Deux types de mouvements d'ensembles laissent la position du c.m. invariant et n'ont donc pas été déduits au préalable :

- les mouvements de respiration du système centrés sur le c.m.
- les mouvements de rotations du système centrés sur le c.m.

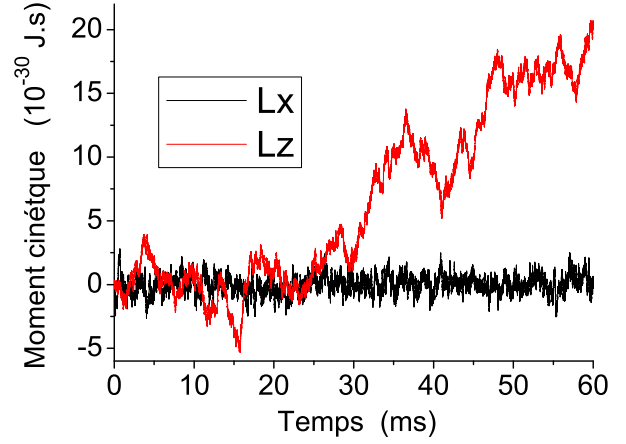
Le forçage radio-fréquence est source de mouvements de respiration périodiques non isotropes (le micro-mouvement). Pour s'affranchir de ce phénomène, nous allons moyenner la mesure des grandeurs \vec{g} sur la période du champ rf, τ_{rf} . Ce sont ces grandeurs moyennes, notées $\bar{\vec{g}}$, que nous utiliserons pour le calcul de la température. Ainsi, si N_{rf} est le nombre de pas de temps δt constituant une période radio-fréquence, nous obtenons :

$$\bar{\vec{g}}(t + \tau_{rf}) = \frac{1}{\tau_{rf}} \int_t^{t+\tau_{rf}} \vec{g}(t') dt' \underbrace{=}_{\text{num}} \frac{1}{N_{rf}} \sum_{j=N_t}^{N_t+N_{rf}} \vec{g}(j \delta t) \quad (2.93)$$

Les mouvements de rotations du système sont possibles selon les trois axes du piège. Pour l'exemple, nous nous affranchirons seulement d'une rotation selon l'axe z . La figure 2.5 présente l'effet d'une telle rotation sur la courbe de température. Celle-ci correspond à un ensemble de 100 ions refroidis par laser dans un piège quadrupolaire linéaire. La structure d'ions connaît un mouvement de rotation d'axe z qui sera rencontré dans le chapitre 3. Les composantes L_x et L_z du moment cinétique total sont données en figure 2.6 pour comparaison. Sur cette dernière figure, le comportement de la courbe de L_z est identique à celui de la température, indiquant que l'énergie cinétique utilisée pour le calcul de la température comporte la part non-thermique due à la rotation. Pour éliminer cette contribution, nous écrivons la vitesse d'une particule dans

**Figure 2.5**

Courbes des températures dans chaque direction de l'espace d'un ensemble d'ions subissant une rotation solide d'axe z . L'algorithme utilisé ici ne soustrait pas l'énergie cinétique due à la rotation.

**Figure 2.6**

Composantes x et z du moment cinétique total de l'ensemble d'ions. Le comportement de L_z témoigne de l'existence d'une rotation dans le plan (x, y) de l'ensemble de la structure.

le référentiel du c.m. en coordonnées cylindriques (R, Θ, Z) :

$$\vec{V}_i = \dot{R}_i \widehat{R}_i + R_i \dot{\Theta}_i \widehat{\Theta}_i + \dot{Z}_i \widehat{Z}_i \quad (2.94)$$

Dans ce système de coordonnées, il est aisé de s'affranchir d'une éventuelle rotation globale d'axe z du système. Il suffit de retrancher la vitesse de rotation moyenne $\langle \dot{\Theta} \rangle$ à la vitesse de chaque particule :

$$\vec{v}_{thi} = \vec{V}_i = \dot{R}_i \widehat{R}_i + R_i (\dot{\Theta}_i - \langle \dot{\Theta} \rangle) \widehat{\Theta}_i + \dot{Z}_i \widehat{Z}_i \quad (2.95)$$

avec,

$$\langle \dot{\Theta} \rangle = \langle L_z / (m R^2) \rangle = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{X_i \dot{Y}_i - Y_i \dot{X}_i}{X_i^2 + Y_i^2} = \left\langle \frac{X V_Y - Y V_X}{X^2 + Y^2} \right\rangle \quad (2.96)$$

Par simplicité, nous continuerons à noter $\langle \dot{\Theta} \rangle$ la vitesse de rotation moyenne dans les équations exprimées en coordonnées cartésiennes, utilisant l'équation (2.96) pour sa définition.

Si \dot{x}_{thi} , \dot{y}_{thi} et \dot{z}_{thi} sont les composantes de la vitesse thermique de la $i^{\text{ème}}$ particule, l'équation (2.95) et les relations de transformation du système de coordonnées polaires au système cartésien, permettent d'exprimer les composantes de la vitesse thermique afin de définir T_x , T_y et T_z .

$$\dot{x}_{thi} = \left(\frac{\dot{R}_i X_i - R_i (\dot{\Theta}_i - \langle \dot{\Theta} \rangle) Y_i}{R_i} \right) = \dot{X}_i + Y_i \langle \dot{\Theta} \rangle \quad (2.97)$$

$$\dot{y}_{thi} = \left(\frac{\dot{R}_i Y_i + R_i (\dot{\Theta}_i - \langle \dot{\Theta} \rangle) X_i}{R_i} \right) = \dot{Y}_i - X_i \langle \dot{\Theta} \rangle \quad (2.98)$$

$$\dot{z}_{thi} = \dot{Z}_i \quad (2.99)$$

Nous pouvons maintenant définir les trois grandeurs que nous assimilons à la température des ions en piège radio-fréquence :

$$\frac{1}{2} k_B T_x = \frac{1}{2} \langle m \dot{x}_{\text{th}}^2 \rangle = \frac{1}{2N_p} \sum_{i=1}^{N_p} m_i \left(\overline{\dot{X}_i + Y_i \langle \dot{\Theta} \rangle} \right)^2 \quad (2.100)$$

$$\frac{1}{2} k_B T_y = \frac{1}{2} \langle m \dot{y}_{\text{th}}^2 \rangle = \frac{1}{2N_p} \sum_{i=1}^{N_p} m_i \left(\overline{\dot{Y}_i - X_i \langle \dot{\Theta} \rangle} \right)^2 \quad (2.101)$$

$$\frac{1}{2} k_B T_z = \frac{1}{2} \langle m \dot{z}_{\text{th}}^2 \rangle = \frac{1}{2N_p} \sum_{i=1}^{N_p} m_i \left(\overline{\dot{Z}_i} \right)^2 \quad (2.102)$$

De façon similaire, nous pouvons définir les températures T_ρ et T_ϕ associées aux composantes du mouvement décomposé dans le système de coordonnées cylindrique. Pour cela, nous utilisons de nouveau le repère du centre de masse :

$$\frac{1}{2} k_B T_\rho = \frac{1}{2N_p} \sum_{i=1}^{N_p} m_i \left\{ \overline{\left(\frac{X_i \dot{X}_i + Y_i \dot{Y}_i}{\sqrt{X_i^2 + Y_i^2}} \right)} \right\}^2 \quad (2.103)$$

$$\frac{1}{2} k_B T_\phi = \frac{1}{2N_p} \sum_{i=1}^{N_p} m_i \left\{ \overline{\left(\frac{X_i \dot{Y}_i - Y_i \dot{X}_i}{\sqrt{X_i^2 + Y_i^2}} \right) - \sqrt{X_i^2 + Y_i^2} \langle \dot{\Theta} \rangle} \right\}^2 \quad (2.104)$$

et nous vérifions que $T_\rho + T_\phi = T_x + T_y$.

2.4.2 Remarques sur l'implémentation

La première remarque concerne les erreurs générées par la soustraction de la rotation solide. En effet, le calcul du terme $\langle \dot{\Theta} \rangle$ est susceptible de générer des divergences lorsqu'une particule se trouve trop près de la position du centre de masse. Cela arrive fréquemment lorsque les ions évoluent au sein d'un piège quadrupolaire, pour lequel la densité de particule est homogène à basse température, et notamment au centre du piège où se situe le centre de masse. Il est alors indispensable d'utiliser dans le même temps un algorithme de mesure de température qui n'effectue pas la soustraction d'un éventuel mouvement de rotation solide, et sert ainsi de référence lorsque d'autres grandeurs, par exemple le moment cinétique, ne traduisent pas la présence d'une rotation d'ensemble du système.

La seconde remarque concerne la réalisation de mesures de températures moyennées sur des intervalles de temps supérieurs à la période rf (ces intervalles devant rester des multiples de cette période). Considérons que nous souhaitons obtenir la température moyennée sur un intervalle de temps Δt équivalant à dix périodes rf. Nous aurions pour cela deux possibilités. La première est de calculer une température sur chacune des dix périodes rf constituant l'intervalle. Nous pouvons alors qualifier ces températures de "températures élémentaires" puisque la méthode de calcul présentée dans la section précédente ne permet pas de déterminer la température en un temps plus bref que la période rf. Il s'agit ensuite de calculer la moyenne de ces dix températures élémentaires, afin d'obtenir la température moyenne souhaitée. Nous pourrions aussi décider de moyenner les grandeurs idoines sur l'intervalle Δt entier, puis calculer la température moyenne sur l'intervalle à l'aide de ces grandeurs. Nous montrons dans la suite que seule la première

solution est adéquate.

Soit $\vec{\xi}$ la vitesse instantanée corrigée de la rotation dans le référentiel du centre de masse :

$$\vec{\xi} = \left(\dot{X} + Y \langle \dot{\Theta} \rangle \right) \hat{x} + \left(\dot{Y} - X \langle \dot{\Theta} \rangle \right) \hat{y} + \dot{z}_M \hat{z} \quad (2.105)$$

telle que $\vec{v}_{th} = \vec{\xi}$.

Soit une température élémentaire T_{rf} définie par :

$$\frac{3}{2} k_B T_{rf} = \frac{1}{2} \left\langle m \left(\vec{\xi} \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle m \left\| \frac{1}{\tau_{rf}} \int_{t'}^{t' + \tau_{rf}} \vec{\xi}(t) dt \right\|^2 \right\rangle \quad (2.106)$$

Si nous souhaitons connaître la température moyenne T_k sur k périodes rf, nous procéderons en effectuant la moyenne des k températures T_{rfj} individuelles calculées sur les $j = \{1, \dots, k\}$ périodes rf :

$$T_k = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k T_{rfj} \quad (2.107)$$

En effet, si nous voulions calculer la température T_k par l'intermédiaire de la vitesse thermique \vec{v}_{th} moyennée sur les k périodes rf, nous obtiendrions une température \tilde{T}_k définie par :

$$\frac{3}{2} k_B \tilde{T}_k = \frac{1}{2} \left\langle m \left\| \vec{v}_{th} \right\|^2 \right\rangle = \left\langle \left\| \frac{m}{k \tau_{rf}} \int_{t'}^{t' + k \tau_{rf}} \vec{\xi}(t) dt \right\|^2 \right\rangle \quad (2.108)$$

$$= \left\langle \left\| \frac{m}{k \tau_{rf}} \sum_{j=1}^k \int_{t' + (j-1)\tau_{rf}}^{t' + j \tau_{rf}} \vec{\xi}(t) dt \right\|^2 \right\rangle = \left\langle \left\| \frac{m}{k} \sum_{j=1}^k \vec{v}_{thj} \right\|^2 \right\rangle \quad (2.109)$$

$$= \frac{1}{k^2} \sum_{j=1}^k \langle m \left\| \vec{v}_{thj} \right\|^2 \rangle + \frac{2}{k^2} \sum_{i=1}^k \sum_{j=i+1}^k \langle m \vec{v}_{thi} \cdot \vec{v}_{thj} \rangle \quad (2.110)$$

$$= \frac{1}{k} T_k + \frac{2}{k^2} \sum_{\substack{i=1 \\ j>i}}^k \langle m \vec{v}_{thi} \cdot \vec{v}_{thj} \rangle \quad (2.111)$$

Si, pour simplifier, le système se trouve à l'équilibre thermodynamique, la température T_k est constante quelle que soit la valeur de k , et nous avons alors :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} T_k = 0 \quad (2.112)$$

Le terme $\sum_{i \neq j} \langle m \vec{v}_{thi} \cdot \vec{v}_{thj} \rangle$ se comporte comme $k(k-1)/2 \sim k^2$. Ce dernier terme ne s'annule donc pas lorsque $k \rightarrow \infty$ mais ne correspond aucunement à ce que nous attendons lors d'une mesure de température, puisqu'il ne constitue pas une mesure de l'énergie cinétique des particules.

Chapitre 3

Refroidissement Doppler par un unique laser

Dans ce chapitre, nous étudions de façon numérique le rôle de l'interaction coulombienne dans le refroidissement d'un ensemble d'ions confinés dans un quadrupôle linéaire, et soumis au refroidissement Doppler d'un unique faisceau laser. Les simulations de dynamique moléculaire, utilisant un potentiel rf idéal ou le pseudo-potentiel associé, montrent que l'efficacité du refroidissement dépend de façon cruciale du potentiel de confinement, fixant la morphologie de l'ensemble d'ions à basse température. Des phénomènes de rotations des ensembles d'ions sont mis en évidence, à la fois dans le potentiel rf et dans le pseudo-potentiel.

3.1 Introduction

La technique du refroidissement Doppler permet de refroidir des atomes ionisés jusqu'à des températures de quelques centaines de μK selon l'espèce atomique (cf. section 2.3.1). Certaines expériences menées avec des ions piégés utilisent un unique faisceau laser pour effectuer le refroidissement. Or, il est établi que le refroidissement Doppler, s'il engendre une diminution de la température selon l'axe du faisceau laser, induit dans le même temps un chauffage dans le plan transverse. Ce chauffage est dû au phénomène de ré-émission spontanée des photons qui produit l'analogie d'une marche aléatoire dans l'espace de l'impulsion des particules (cf. section 2.3.1). L'émission spontanée a lieu selon les trois directions de l'espace, mais seule la direction de propagation du faisceau laser profite du phénomène d'absorption des photons qui compense ce chauffage. Pour les ions cependant, l'interaction coulombienne entre les particules permet de coupler les mouvements dans les trois directions de l'espace. Dans la pratique, c'est ce couplage qui est mis à profit pour refroidir l'ensemble des degrés de liberté des atomes ionisés avec un unique faisceau laser.

Cependant, à très basses températures, les structures stables des ensembles d'ions confinés en pièges rf possèdent des morphologies très différentes suivant les champs auxquels les ions sont soumis. Le couplage des ions par l'interaction coulombienne s'effectue alors de façons très différentes en fonction, par exemple, de la morphologie de la structure, ou du nombre et de la disposition des plus proches voisins de chaque ion. Nous souhaitons donc déterminer si le couplage dû à l'interaction coulombienne est toujours suffisant pour refroidir un ensemble d'ions dans les trois directions de l'espace en utilisant un unique laser.

Concernant les transitions entre structures stables, aussi appelées transitions de phases de seconde espèce, une étude analytique a été menée dans le cas du quadrupôle linéaire par D.H.E. Dubin [10]. Une étude numérique a notamment été réalisée, au moyen de la dynamique moléculaire, par J.P. Schiffer [11]. Dans celle-ci, les ions sont confinés au sein d'un pseudo-potentiel. Leur énergie cinétique est rendue pratiquement nulle par l'application d'un thermostat dont la température est telle que les ions sont figés dans une position d'équilibre statique, minimisant leur énergie potentielle. Cette étude révèle que les ions s'organisent de façons complexes, en différentes structures, dépendant du rapport d'aspect caractérisant le potentiel de confinement. L'étude décrite dans [11] a été réalisée dans le cas d'un pseudo-potentiel à symétrie cylindrique :

$$\Psi_{4l} = \frac{1}{2} m \omega_r^2 r^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \quad (3.1)$$

Dans ce cas, le système dépend uniquement de deux paramètres, qui sont le nombre d'ions confinés N_p , et le rapport d'aspect du potentiel :

$$\alpha = (\omega_z/\omega_r)^2 \quad (3.2)$$

Nous rapportons ici le comportement de ce type de systèmes à très basse température, tels qu'étudiés par Dubin et Schiffer, dont un résumé est donné par les schémas de la figure 3.1. Nous prenons pour exemple un ensemble de 70 ions. Lorsque le rapport d'aspect du potentiel est suffisamment petit, $\alpha < 1,5 \times 10^{-3}$, la configuration d'énergie minimale est une chaîne d'ions disposée sur l'axe z . Cette structure a été observée et interprétée dès l'avènement des pièges linéaires dans [84], puis intensément étudiée par G. Morigi *et al.* [85–88] ainsi que le refroidissement de ses degrés de liberté longitudinaux [56, 68, 89]. L'intérêt pour ce type de structures provient du fait que l'ensemble des ions se situe dans une zone où le champ rf est nul. Cela permet d'affranchir la dynamique des ions du forçage induit par la radio-fréquence, et procure un support idéal, originellement proposé en tant que tel par J.I. Cirac et P. Zoller dans [18], pour l'implémentation de protocoles relevant de l'information quantique.

Pour $\alpha > 1,5 \times 10^{-3}$, les ions s'organisent tout d'abord en zig-zag plan (structure 2D). Cette structure, aussi décrite lors des premières expériences en pièges rf linéaires dans [84], puis étudiée successivement par Dubin [10], Fishman [90] et Campo [91], peut aussi s'avérer utile en information quantique du fait des propriétés de ses modes de vibration [92].

A partir de $\alpha \simeq 3,15 \times 10^{-3}$ apparaît une configuration en zig-zag torsadé (structure 3D). Celle-ci est étudiée en détail par Schiffer dans [11]. L'angle de torsion du zig-zag augmente avec α (cf. figure 3.2).

Pour des valeurs de α de plus en plus grandes, la structure possède une extension 3D sans organisation remarquable. Ce type de structures a été obtenu expérimentalement et numériquement par M. Drewsen dans [25], pour un nombre d'ions très élevé ($> 10^5$ ions). Des applications de ce type de structures couplées à des cavités QED ont récemment été proposées [93].

Pour $\alpha > 10$, le potentiel est tel que l'ensemble des ions se dispose dans le plan $z = 0$, et forme alors un disque plan [94, 95] (structure 2D). A ce stade, augmenter α se traduit par une dilatation de la structure dans le plan transverse jusqu'au déconfinement des ions.

La description précédente est valable dans le cas d'un pseudo-potentiel à symétrie cylindrique. Si cette propriété n'est plus vérifiée, il est signalé dans [11], bien que l'étude n'y apparaisse pas, que l'organisation spatiale des ions a tendance à s'étendre selon la direction de moindre raideur du potentiel. Dans ce cas, afin de demeurer un paramètre pertinent pour la

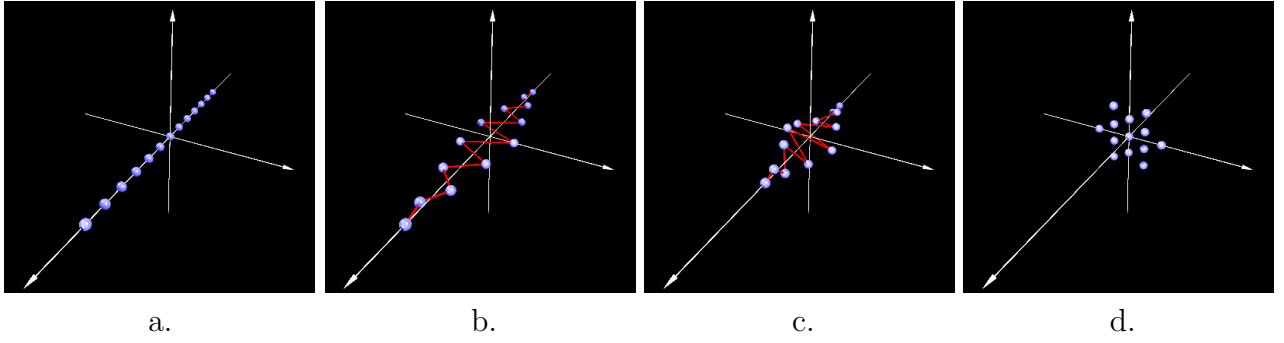


Figure 3.1 – Schémas des structures d'équilibre à basse température correspondant aux cas : a. chaîne d'ions (1D), b. zig-zag (2D), c. zig-zag torsadé (3D) et d. disque (2D).

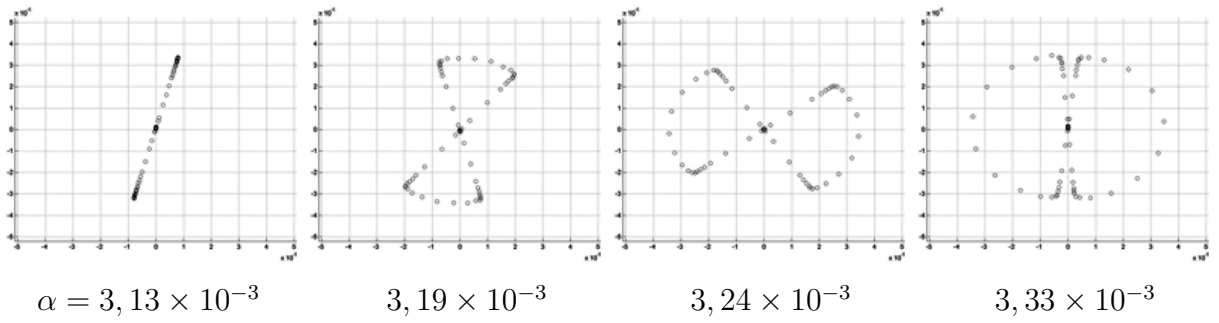


Figure 3.2 – Images dans le plan radial de différentes structures de 70 ions calculées en pseudo-potential pour des valeurs de α correspondant à des configurations en zig-zag. Un refroidissement visqueux a été utilisé pour figer les ions dans leurs positions d'équilibre. L'angle de torsion du zig-zag est apparent. L'isotropie du potentiel radial engendre une orientation aléatoire de la structure.

description du système, α doit être exprimé à partir de cette raideur minimale (cf. section 3.2.1).

Dans ce chapitre, nous appuyant sur les études réalisées précédemment, nous tentons d'analyser l'efficacité du couplage coulombien pour refroidir les degrés de liberté des ions, orthogonaux à la direction du faisceau laser, au moyen de simulations numériques. Pour ce faire, nous simulons ces différents systèmes d'ions de façon systématique, partant de conditions initiales pour lesquelles les ions sont à 1K et en interaction avec le laser. L'énergie cinétique des ions diminuant, la dynamique devient stationnaire. L'énergie cinétique n'étant pas, a priori, répartie de façon isotrope, nous utilisons une température telle que définie dans le chapitre 2.4 sur chacune des trois directions de l'espace. Nous calculons le rapport des températures obtenues dans les directions orthogonales au faisceau laser à celle obtenue selon l'axe du faisceau. Ce rapport des températures stationnaires constitue un indicateur direct de l'efficacité du couplage coulombien au refroidissement des directions orthogonales au faisceau laser.

Une partie de l'énergie cinétique des ions ne transparaît cependant pas dans la température. Il s'agit de l'énergie cinétique du mode commun de vibration des ions au sein du potentiel du piège, i.e. l'énergie cinétique du centre de masse (c.m.). La dynamique de ce dernier joue un rôle particulier puisqu'elle est découplée de l'interaction coulombienne. Une étude antérieure de son comportement, réalisée par G.C. Hegerfeldt [66], montre que le refroidissement du c.m. est conditionné par la disposition du faisceau laser relativement aux axes propres du potentiel de piégeage. Pour obtenir un refroidissement effectif selon les trois directions de l'espace, chaque axe

propre doit posséder une projection non-nulle du faisceau laser. L'étude de l'énergie cinétique du c.m. apparaît complémentaire à l'étude du couplage coulombien, nous discutons donc son comportement dans les différentes configurations rencontrées.

3.2 Réalisation de l'étude

Puisqu'un seul laser est utilisé, nous devons choisir sa direction. Pour une direction donnée, le sens de propagation des photons incidents affecte uniquement la position d'équilibre des ions par un petit décalage dû à la pression de radiation. Des faisceaux lasers de directions identiques mais de sens de propagation opposés sont donc des configurations équivalentes en ce qui concerne les propriétés du refroidissement. Nous faisons le choix de disposer le laser selon une direction du plan transverse du piège. Ainsi, nous séparons l'étude du couplage des degrés de libertés en deux parties bien distinctes : une partie correspondant au potentiel purement statique selon la direction longitudinale z , et une partie soumise au forçage radio-fréquence située dans le plan transverse, de direction orthogonale au faisceau laser.

3.2.1 Les paramètres de piégeage

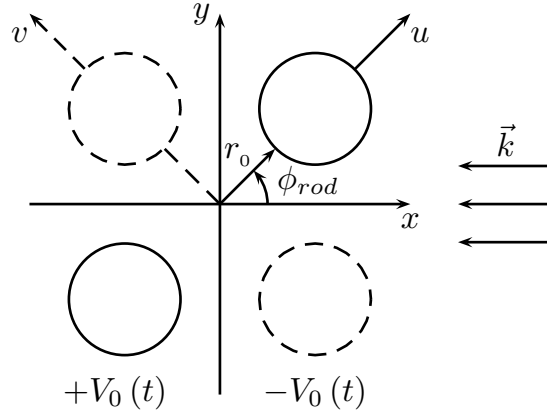


Figure 3.3 – Schéma des électrodes rf du piège, tournées d'un angle ϕ_{rod} par rapport aux axes de coordonnées cartésiennes. Le faisceau laser de vecteur d'onde \vec{k} est orienté selon $-\hat{x}$.

Dans un souci de réalisme, nous décidons de simuler un faisceau laser passant entre les électrodes du piège. Cependant, il est souhaitable de conserver la direction du faisceau sur un axe du système de coordonnées cartésien, afin d'effectuer les mesures de températures par un minimum de calculs. Or, la forme de l'expression mathématique du potentiel rf habituellement utilisée décrit une configuration telle que les électrodes du piège se situent elles aussi sur les axes du système de coordonnées. Nous ré-écrivons donc le potentiel du quadrupôle linéaire Φ_{4l} en fonction d'un angle ϕ_{rod} arbitraire, correspondant à la rotation des électrodes par rapport aux axes du système de coordonnées, comme indiqué sur la figure 3.3.

$$\Phi_{4l} = q_e V_0(t) \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \cos(2(\phi - \phi_{rod})) - \frac{q_e U_{dc}}{2z_0^2} (r^2 - 2z^2) \quad (3.3)$$

$$= \frac{q_e V_0(t)}{r_0^2} [(x^2 - y^2) \cos(2\phi_{rod}) + 2xy \sin(2\phi_{rod})] - \frac{q_e U_{dc}}{2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (3.4)$$

où $V_0(t) = V_{dc} - V_{ac} \cos(\Omega t)$. Nous notons les directions des électrodes par \hat{u} et \hat{v} . Ainsi, les paramètres des équations de Mathieu s'expriment maintenant pour les variables u et v :

$$q_u = -q_v = \frac{4 q_e V_{ac}}{m r_0^2 \Omega^2} \quad (3.5)$$

$$a_u = -a_v = \frac{8 q_e V_{dc}}{m r_0^2 \Omega^2} \quad (3.6)$$

En plus du potentiel radio-fréquence, nous réalisons l'étude en pseudo-potentiel, pour lequel les structures d'équilibre ont été obtenues par J.P. Schiffer lors d'une étude précédente dans [11]. Le pseudo-potentiel associé Ψ_{4l} prend une forme simple dans le système de coordonnées (u, v, z) :

$$\Psi_{4l} = \frac{1}{2} m \omega_{r+}^2 u^2 + \frac{1}{2} m \omega_{r-}^2 v^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \quad (3.7)$$

$$\text{avec,} \quad \omega_{r\pm} = \frac{\Omega \beta_{\pm}}{2} = \frac{\Omega}{2} \sqrt{\frac{q_u^2}{2} \pm a_u - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_z}{\Omega}\right)^2} \quad (3.8)$$

$$\omega_z = \sqrt{\frac{2 q_e U_{dc}}{m z_0^2}} \quad (3.9)$$

Le terme en ω_z/Ω apparaissant dans l'expression de $\omega_{r\pm}$ correspond à la contribution transverse du potentiel statique U_{dc} (cf. section 1.1.2). La forme cartésienne que nous implémentons dans le programme s'écrit :

$$\begin{aligned} \Psi_{4l} = & \frac{q_e^2 V_{ac}^2}{m r_0^2 \Omega^2} \frac{x^2 + y^2}{r_0^2} + \frac{q_e V_{dc}}{r_0^2} [(x^2 - y^2) \cos(2\phi_{\text{rod}}) + 2xy \sin(2\phi_{\text{rod}})] \\ & - \frac{q_e U_{dc}}{2z_0^2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Nous choisissons une configuration symétrique en positionnant les électrodes à égale distance de l'axe du faisceau laser, soit $\phi_{\text{rod}} = \pi/4$. Le pseudo-potentiel prend une forme simple pour cette valeur :

$$(\Psi_{4l})_{|\phi_{\text{rod}}=\pi/4} = \frac{1}{2} m \frac{\omega_{r+}^2 + \omega_{r-}^2}{2} (x^2 + y^2) + \frac{1}{2} m (\omega_{r+}^2 - \omega_{r-}^2) xy + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \quad (3.11)$$

Avec les notations précédentes, nous définissons le rapport d'aspect du potentiel :

$$\alpha = \left(\frac{\omega_z}{\omega_{r-}}\right)^2 = \frac{1}{2} \frac{(\omega_z/\Omega)^2}{q_u^2 - 2a_u - (\omega_z/\Omega)^2} \quad (3.12)$$

où ω_{r-} est la fréquence caractéristique minimale du potentiel dans le plan radial lorsqu'une asymétrie est appliquée dans ce plan (pour $a_u > 0$ soit un potentiel $V_{dc} > 0$). Lorsque $a_u = 0$, nous retrouvons le paramètre correspondant au cas d'un pseudo-potentiel symétrique utilisé dans [11].

L'étude est réalisée en faisant varier le paramètre α . En pseudo-potentiel, il est démontré dans [11] que ce type de système est décrit de façon complète par l'emploi de deux paramètres uniquement, qui sont le rapport d'aspect du potentiel α ainsi que le nombre d'ions N_p . Il est

donc équivalent de faire varier ω_z ou ω_r pour influencer sur α . Cependant, en potentiel rf nous devons aussi tenir compte du paramètre q_u des équations de Mathieu, qui caractérise l'ampleur de la dynamique rapide due au champ radio-fréquence. Si nous souhaitons pouvoir comparer les simulations effectuées en potentiel rf, pour différentes valeurs de α , nous devons nous assurer que q_u est toujours le même, puisqu'il intervient dans le chauffage rf. Or, à q_u fixé, la seule façon de faire varier ω_r est d'influer sur Ω , chose que nous souhaitons éviter puisque la fréquence du champ rf définit une base de temps pour la simulation (par le choix du pas d'intégration). Dans la suite, nous faisons donc varier ω_z pour changer le rapport d'aspect du potentiel. Nous choisissons de mener l'étude pour $q_u = 0,187$, ce qui constitue une valeur réaliste. Nous fixons $\Omega/2\pi = 10$ MHz. A ces deux paramètres est associé un pseudo-potential radial dont la raideur est caractérisée (dans le cas isotrope) par $\omega_r/2\pi = 0,66$ MHz. Pour des ions calcium (de masse $m = 40$ amu), nous prenons $V_{ac} = 480$ V et $r_0 = 2,5$ mm pour obtenir la valeur de q_u donnée précédemment.

3.2.2 Les paramètres d'interaction laser

Sauf mention contraire, nous n'utilisons pour réaliser l'étude qu'un seul faisceau laser. Le faisceau laser est tel que le vecteur d'onde des photons \vec{k}_L s'écrit :

$$\vec{k}_L = - \|\vec{k}_L\| \hat{x} \quad (3.13)$$

Pour un refroidissement effectif en potentiel rf, la puissance du laser doit être suffisamment importante pour que le taux de refroidissement soit supérieur au taux de chauffage induit par la radio-fréquence. Or, le chauffage rf dépend de la température des ions. De ce fait, à suffisamment basse température, il n'est pas le phénomène limitant le refroidissement. Le chauffage stochastique dû à l'émission spontanée des photons devient l'effet prépondérant. Celui-ci est d'autant plus faible que la puissance laser diminue. Ainsi, une fois la barrière du chauffage rf franchie, la puissance laser peut être baissée dans le but d'atteindre la température Doppler. Il n'est pas primordial pour notre étude d'atteindre la limite Doppler. Par simplicité, nous décidons d'utiliser la même puissance laser quelle que soit la température des ions. Celle-ci est choisie en fixant la valeur de la pulsation de Rabi à $\Omega_r = \Gamma_0$, ce qui est une valeur suffisante pour franchir la barrière du chauffage rf. Nous fixons le désaccord laser à $\delta_L = -\Gamma_0/2$ ce qui est le désaccord optimum pour le refroidissement, lorsque la température des ions est inférieure au kelvin. Avec ce choix de paramètres, les simulations effectuées en pseudo-potential montrent que la température minimale atteignable selon la direction de refroidissement est 1 mK.

3.2.3 Réalisation d'une statistique

Nous effectuons pour chaque système (N_p, α) un ensemble de 15 simulations partant de conditions initiales différentes. Une fois les températures stationnaires obtenues pour chaque simulation, nous réalisons une statistique de façon automatique au moyen d'un programme développé à cette occasion. Ce programme fonctionne comme suit : Nous disposons d'un ensemble de courbes $\{T_{\nu i}(t)\}$ où $\nu \in \{x, y, z\}$ et $i \in \{1, 2, \dots, 15\}$. Insistons sur le fait que, ces courbes correspondant à des températures moyennes stationnaires, la température instantanée fluctue dans le temps autour d'une valeur moyenne. Ces fluctuations (au moins dans le cas du pseudo-potential) sont en grande part dues au nombre de particules fini, et plutôt faible, que nous employons dans les simulations. Nous sommes donc très loin de la limite thermodynamique. En conséquence, nous réalisons une première moyenne temporelle à la suite de laquelle

nous obtenons un ensemble de températures moyennes $\{\bar{T}_{\alpha i}\}$. C'est à partir de ces valeurs que nous effectuons la statistique. Nous calculons le rapport moyen des températures $\langle \bar{T}_\nu / \bar{T}_x \rangle$, ainsi que l'écart type de ce rapport σ_ν :

$$\left\langle \frac{\bar{T}_\nu}{\bar{T}_x} \right\rangle = \frac{1}{15} \sum_{i=1}^{15} \frac{\bar{T}_{\nu i}}{\bar{T}_{xi}} \quad \sigma_\nu^2 = \frac{1}{15} \sum_{i=1}^{15} \left(\frac{\bar{T}_{\nu i}}{\bar{T}_{xi}} \right)^2 - \left\langle \frac{\bar{T}_\nu}{\bar{T}_x} \right\rangle^2 \quad (3.14)$$

3.3 Résultats en pseudo-potentiel

3.3.1 Potentiel radial isotrope

Cette partie de l'étude peut être directement comparée au travail effectué par J.P. Schiffer. Bien que le chauffage rf soit inexistant en utilisant ce potentiel statique, l'emploi du refroidissement Doppler pour effectuer les simulations ne permet pas d'atteindre des températures aussi basses que celles obtenues dans [11] au moyen d'un thermostat. Cependant, les structures que nous obtenons sont en bon accord avec celles trouvées précédemment, aux fluctuations thermiques près. Cela est illustré par les images des positions instantanées des particules en figure 3.4. Il s'agit d'un système de 70 ions dans un pseudo-potentiel défini par $\alpha = 0,91 \times 10^{-3}$.

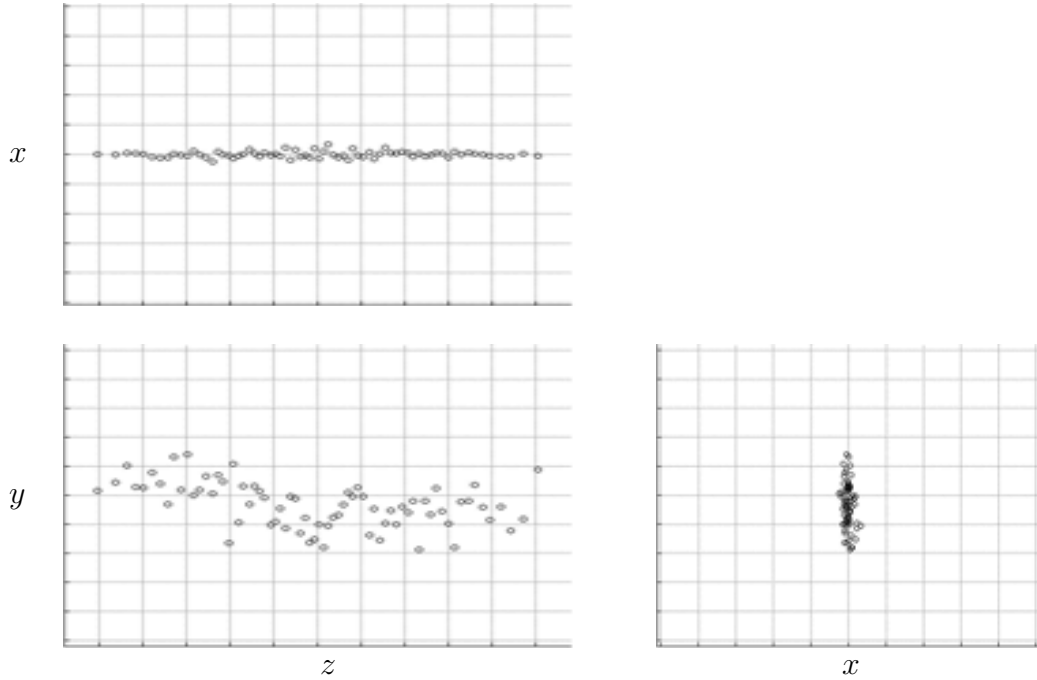


Figure 3.4 – Images des positions instantanées d'un ensemble de 70 ions dans un pseudo-potentiel défini par $\alpha = 0.91 \times 10^{-3}$ et refroidis par un laser aligné sur l'axe x . L'image montre une zone d'étendue spatiale de $10 \mu\text{m}$ selon x et y , et de $1200 \mu\text{m}$ selon z .

Pour cette valeur, la structure stable attendue à très basse température [11] est une ligne d'ions. Ce que nous obtenons est une configuration linéaire des ions, dont l'amplitude du mouvement thermique apparaît de façon évidente selon l'axe y qui n'est pas refroidi directement par laser. Il en est de même selon l'axe z mais la disposition des ions masque le phénomène. Une simulation de ce que fournirait une caméra CCD est donnée en figure 3.5 et révèle que cet élargissement

est expérimentalement observable dans le plan (y, z) (image du bas de la figure 3.5). Cependant, la cause de cet élargissement n'est pas uniquement thermique mais est en partie dû au mouvement du centre de masse. L'efficacité du refroidissement en fonction du paramètre α , et pour différents nombres d'ions, est caractérisée par les courbes des rapports des températures en figure 3.6.

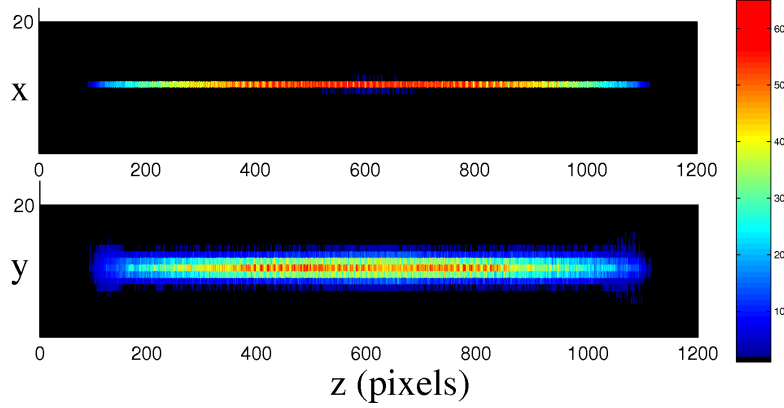


Figure 3.5 – Simulation d'images CCD. Le système est un ensemble de 70 ions piégés dans un pseudo-potentiel défini par $\alpha = 10^{-3}$ et refroidis par laser selon l'axe x . La longueur d'un pixel est $1 \mu\text{m}$ et l'image est intégrée sur un temps de 10 ms.

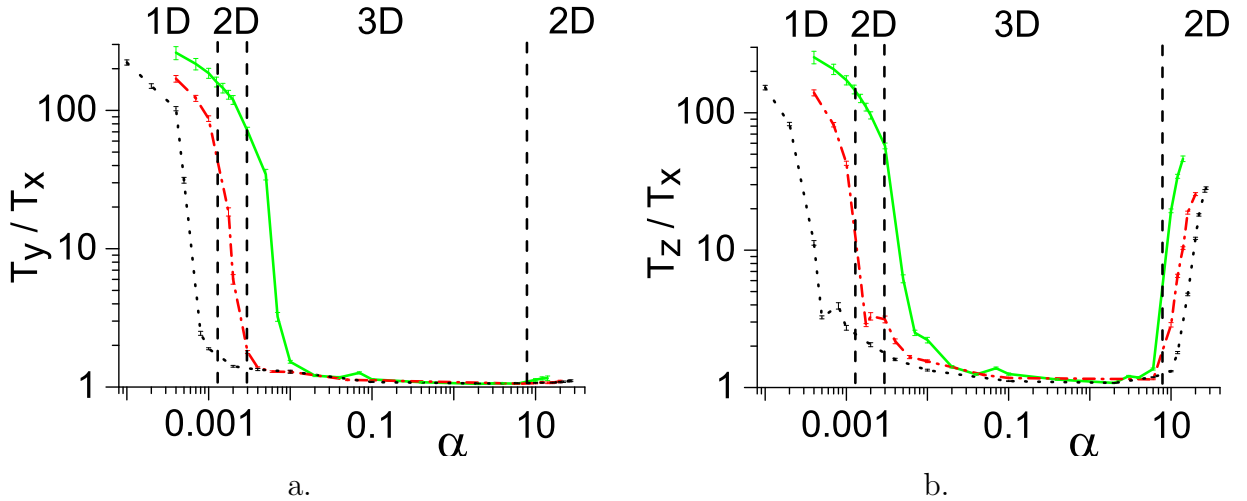


Figure 3.6 – Températures relatives (a) T_y/T_x et (b) T_z/T_x pour un système dans l'état stationnaire, de 35 ions (ligne verte), 70 ions (points-tirets rouges) et 140 ions (pointillés noirs). Les lignes verticales en tirets noirs séparent les différentes configurations dans le cas du système à 70 ions.

Lorsque la structure stable attendue est une ligne d'ions, les directions y et z ne sont pas refroidies et le rapport des températures stationnaires peut dépasser 200. La température atteinte dans la direction du laser est très proche de la température Doppler (0,5 mK pour le Calcium). La majeure partie de l'amplitude du mouvement des ions est alors contenue dans le plan (y, z) .

Pour des valeurs de α correspondant aux structures en zig-zags plans, le couplage entre les différentes directions est de plus en plus efficace et une importante décroissance du rapport des températures est observée. La structure obtenue est très instable du fait des mouvements thermiques, et l'écart entre les deux bras du zig-zag est fluctuant (voir figure 3.7). Les simulations d'images CCD de ce système permettent de mettre en évidence l'amplitude des bras du zig-zag (voir figure 3.8). Cependant, la structure connaît des rotations d'axe z et de sens aléatoire, ce qui résulte sur la figure 3.8 en une zone floue remplissant l'intérieur des bras du zig-zag. Il est alors impossible de faire une différence claire entre zig-zag plan et zig-zag torsadé.

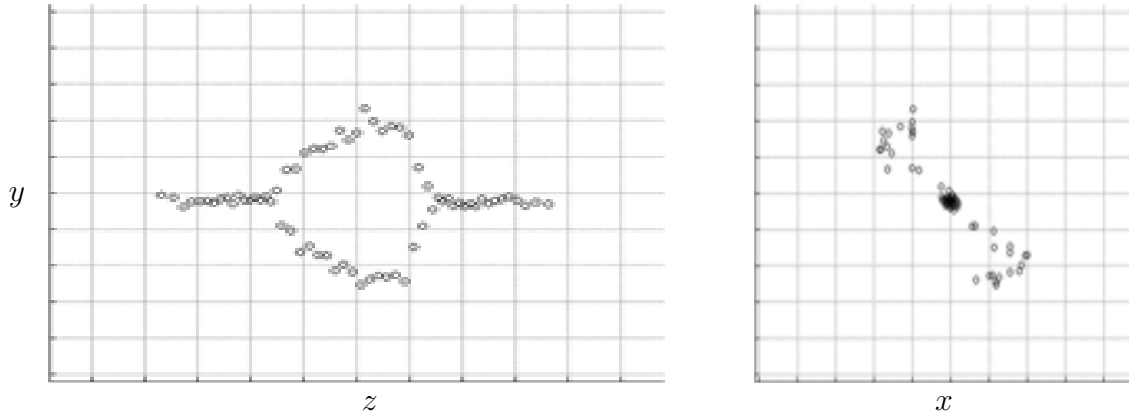


Figure 3.7 – Images de la dynamique instantanée d'un ensemble de 70 ions dans un pseudo-potentiel défini par $\alpha = 2.17 \times 10^{-3}$ et refroidis par un laser aligné sur l'axe x . L'image montre une zone d'étendue spatiale de $10 \mu\text{m}$ selon x et y , et de $1200 \mu\text{m}$ selon z .

Une distinction claire de la transition du zig-zag plan au zig-zag torsadé est donc impossible dans notre cas. Néanmoins, il apparaît que la structure est de moins en moins fluctuante à mesure que le paramètre α augmente. Cela permet de distinguer de façon nette des structures en zig-zags torsadés dont les angles de torsion sont suffisamment élevés (de l'ordre de π). Cela se traduit sur la figure 3.6 par un rapport des températures très proche de l'unité dans le domaine du paramètre α pour lequel des structures 3D sont attendues. Les rotations aléatoires d'axe z sont cependant toujours présentes.

Lorsque α atteint des valeurs pour lesquelles les ions se disposent en une structure plane dans le plan radial (x, y) , on constate une brusque remontée du rapport T_z/T_x . Cela s'interprète par le fait que, dans cette configuration particulière, le mouvement des ions dans la direction z est couplé aux autres directions uniquement par l'amplitude du mouvement thermique. Ainsi, plus le potentiel est raide dans la direction z (i.e. plus la valeur de α est grande), plus la température T_z des ions doit être importante pour que l'amplitude de leurs mouvements thermiques selon z soit suffisante pour permettre le couplage aux autres directions. Ce couplage permet alors l'obtention d'une température stationnaire dans la direction z .

Dans cette section, nous avons montré que le refroidissement d'un ensemble d'ions confinés dans un pseudo-potentiel à symétrie cylindrique dépend de façon importante du rapport d'aspect α . Seul le couplage coulombien des ions formant des structures d'étendue spatiale tridimensionnelle permet l'obtention d'une température isotrope. Quelle que soit la valeur du rapport d'aspect, l'énergie cinétique du centre de masse est réduite uniquement selon la direction du faisceau laser. Comme nous l'attendions [66], seuls les axes propres de son mouvement possédant une projection non nulle du vecteur d'onde du faisceau laser peuvent être refroidis.

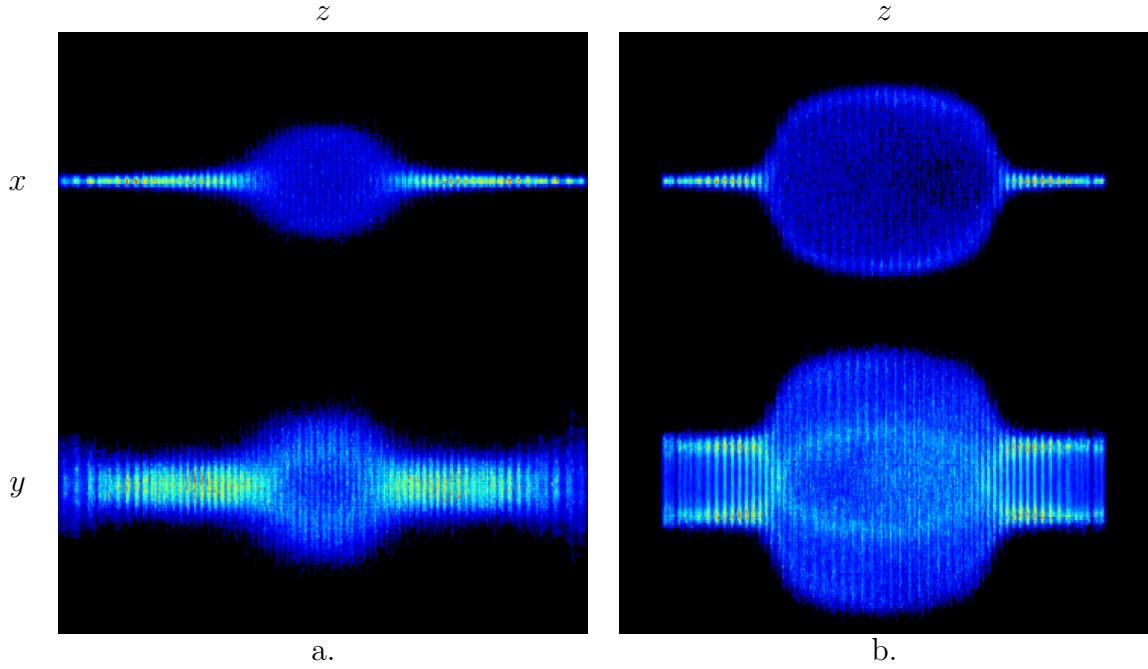


Figure 3.8 – Simulations d’images CCD d’un ensemble de 70 ions dans un pseudo-potentiel radial isotrope pour : (a) $\alpha = 1,8 \times 10^{-3}$, la longueur de la structure est $\Delta z \simeq 800 \mu\text{m}$ et la distance maximale entre les bras du zig-zag est $\Delta r \simeq 4 \mu\text{m}$ et (b) $\alpha = 2,5 \times 10^{-3}$, $\Delta z \simeq 700 \mu\text{m}$, $\Delta r \simeq 6 \mu\text{m}$. Bien qu’existent dans la direction z , le mouvement du centre de masse est uniquement visible dans le plan (y, z) du fait de la différence d’échelle.

Dans le plan radial d’un pseudo-potentiel à symétrie cylindrique ($a = 0$), aucune direction du mouvement n’est privilégiée. Un axe propre du mouvement est donc constitué par la direction du faisceau laser lui-même, qui est ainsi la seule direction selon laquelle le mouvement du centre de masse est réduit.

Nous souhaitons maintenant étudier l’influence d’une asymétrie du pseudo-potentiel dans le plan radial. Pour cela, nous brisons la symétrie cylindrique par l’emploi d’une tension statique sur les électrodes rf, équivalente à $a_u \neq 0$.

3.3.2 Potentiel radial anisotrope

Dans cette partie nous brisons la symétrie du pseudo-potentiel radial par un potentiel V_{dc} d’une valeur typique de 10 V, soit un paramètre des équations de Mathieu $a_u = 7,805 \times 10^{-3}$. Cette valeur est assez faible pour ne pas modifier de façon significative la profondeur du puits de potentiel. Cependant, cela est suffisant pour changer le comportement des systèmes. A la différence du cas symétrique, seuls la température T_z et le mouvement du centre de masse dans la direction z ne sont pas systématiquement réduits. Ceci est dû au fait que l’asymétrie engendre l’existence de deux axes propres du mouvement, qui sont les axes u et v . Le laser ayant une projection sur chacun d’eux, l’énergie cinétique des ions est réduite dans l’intégralité du plan transverse dont les températures T_x et T_y approchent la limite Doppler. Ainsi, l’efficacité du couplage coulombien est donnée par la figure 3.9 qui présente le rapport des températures T_z/T_x en fonction de α . Afin de faciliter la description du comportement pour les différents α , nous choisissons l’ensemble de 70 ions comme cas représentatif des systèmes.

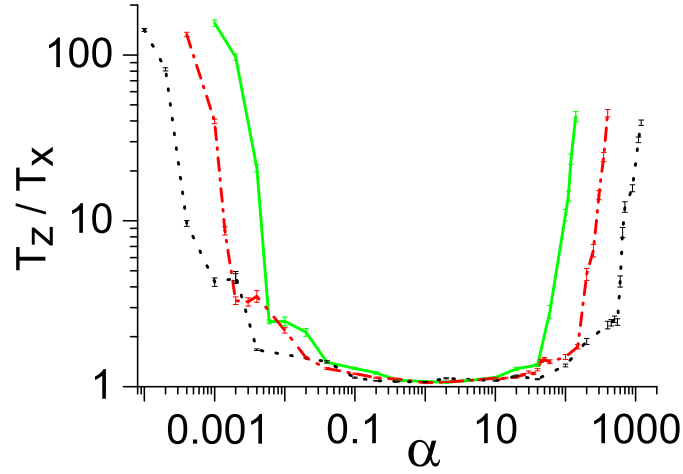


Figure 3.9 – Rapport des températures T_z/T_x pour 35 ions (ligne continue verte), 70 ions (points-tirets rouges) et 140 ions (pointillés noirs).

Pour ce nombre d'ions, lorsque $\alpha \leq 1,5 \times 10^{-3}$ la structure forme toujours une chaîne d'ions le long de l'axe z . Comme indiqué précédemment, seule la direction z n'est pas refroidie.

En revanche, pour des valeurs supérieures de α , la dynamique devient très différente de celle rencontrée dans le cas symétrique. La structure obtenue est de nouveau un zig-zag plan, mais les bras du zig-zag s'ouvrent cette fois dans la direction v , qui est la direction de moindre raideur du potentiel dans le plan radial. La configuration instantanée de cette structure est illustrée par les images de la figure 3.10. La structure ne subit plus de rotations aléatoires d'axe z . Comme précédemment, on observe pour ces valeurs de α une rapide décroissance du rapport T_z/T_x .

Lorsque le rapport d'aspect atteint la valeur $\alpha \simeq 2 \times 10^{-2}$, une nouvelle structure apparaît.

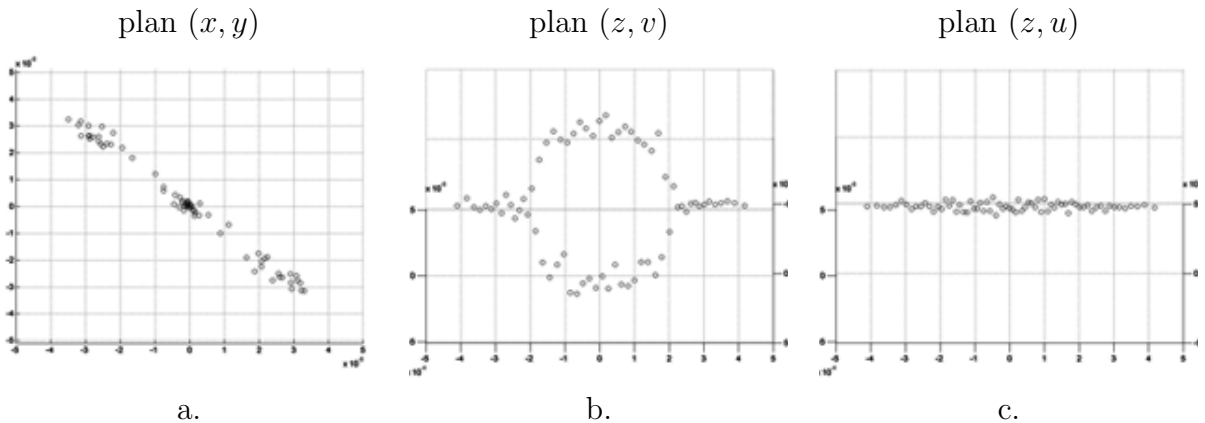


Figure 3.10 – Image des positions instantanées du système de 70 ions dans le pseudo-potentiel anisotrope défini par $\alpha = 3 \times 10^{-3}$ et $a = 7,805 \times 10^{-3}$: (a) vue selon l'axe z du plan radial dans le repère (x, y) , (b) vue selon l'axe u et (c) vue selon l'axe v . La surface de la zone représentée sur l'image (a) mesure $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$, la dimension selon z est 1 mm. La structure est disposée dans le plan (z, v) et ne subit plus de rotations stochastiques d'axe z .

Elle est constituée du zig-zag plan précédemment décrit dans le plan (z, v) , entre les bras duquel se situe une nouvelle chaîne d'ions disposés le long de l'axe z .

Pour $\alpha \simeq 4 \times 10^{-2}$, la chaîne d'ions centrale devient à son tour un zig-zag plan, mais disposé dans le plan (z, u) , orthogonal au premier zig-zag. Une simulation de l'image obtenue par caméra CCD de ce type de structure est donnée en figure 3.11 où les deux zig-zags orthogonaux sont clairement visibles. Des valeurs supérieures de α conduisent à des structures

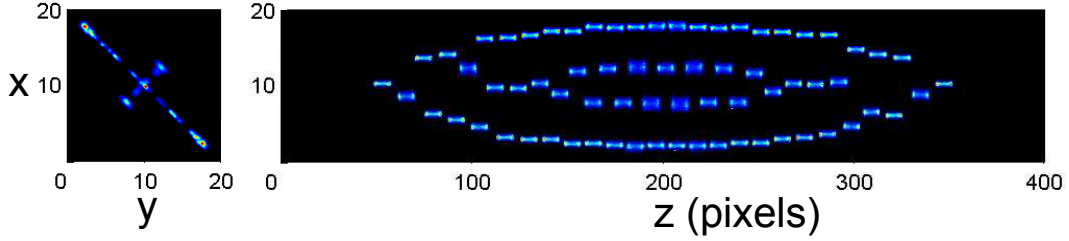


Figure 3.11 – Simulation d'image CCD d'un système de 70 ions confinés par un pseudo-potentiel asymétrique défini par $\alpha = 4 \times 10^{-2}$ et $a_u = 7,805 \times 10^{-3}$. Les ions subissent un refroidissement Doppler par un laser dirigé selon $-\hat{x}$. La structure obtenue est constituée de deux zig-zag orthogonaux, disposés dans les plans (z, u) pour le plus petit et (z, v) pour le plus grand. Le mouvement du centre de masse dans la direction z produit une élongation de la tache de fluorescence dans cette direction.

sans organisation remarquable. Lorsque α atteint des valeurs pour lesquelles une structure plane est attendue dans le plan radial pour le cas isotrope ($\alpha \geq 30$), les ions s'organisent en une structure linéaire selon la direction v . Dans la limite des très grands α ($\gtrsim 800$) les ions forment une chaîne le long de l'axe v . Pour les mêmes raisons que dans le cas symétrique, le rapport T_z/T_x connaît une importante augmentation pour ces valeurs de α , mettant en évidence le découplage du mouvement des ions dans la direction z .

Dans le cas asymétrique, un comportement singulier se manifeste pour les faibles valeurs de α , pour lesquelles le système d'ions forme une structure linéaire, proche d'une chaîne, le long de z . Nous observons que le refroidissement laser, combiné à l'asymétrie du potentiel, induit une rotation des ions autour de l'axe z . En effet, lorsque la dynamique devient stationnaire, la vitesse de rotation moyenne des ions calculée dans le référentiel du centre de masse, $\langle \dot{\theta} \rangle$, tend vers une valeur $\langle \omega \rangle_{st}$ constante pour a_u fixé. Ce phénomène est illustré sur la figure 3.12 où le rapport $\langle \omega \rangle_{st} / \omega_{r-}$ est tracé pour $N_p = 70$ ions en fonction du paramètre a_u . Le sens de la rotation est déterminé par la polarité du potentiel V_{dc} ainsi que la direction du faisceau laser (ici x), son sens de propagation (\hat{x} où $-\hat{x}$) n'affectant pas la rotation. Lorsque $V_{dc} > 0$ et le laser dirigé selon x , la rotation s'effectue dans le sens trigonométrique ($\langle \omega \rangle_{st} > 0$) et la vitesse angulaire prend sa valeur maximale. Quand on modifie la direction du laser dans le plan transverse, ϕ_l , la vitesse angulaire $\langle \omega \rangle_{st}$ décroît à mesure que l'on s'écarte de l'axe x ($\phi_l = 0$), et devient nulle lorsque la direction du laser s'aligne avec la paire d'électrodes ($\phi_l = \pm\pi/4$). Passé cet angle, la rotation s'effectue en sens inverse et $\langle \omega \rangle_{st}$ trouve son maximum lorsque le laser est aligné selon l'axe y . Il est vérifié que conserver le laser selon l'axe x et modifier l'angle de rotation des électrodes ϕ_{rod} en correspondance, conduit au même comportement. Lorsque deux lasers de puissances identiques sont allumés simultanément, dont l'un selon x et l'autre selon y , aucune rotation n'est observée.

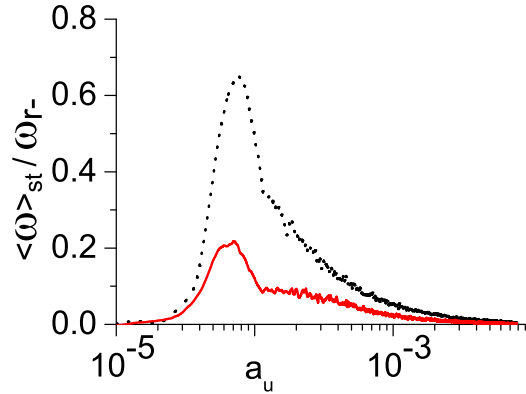


Figure 3.12 – Courbe de la vitesse de rotation moyenne stationnaire $\langle \omega \rangle_{st}$ relative à ω_r d'un système de 70 ions dans un pseudo-potentiel de $\alpha = 1 \times 10^{-3}$ (pointillés noirs) et $\alpha = 2 \times 10^{-3}$ (ligne rouge), en fonction du paramètre de Mathieu a .

De plus, cet effet demeure si nous modélisons le refroidissement Doppler de deux lasers contra-propageant selon l'axe x , par une force de viscosité $\vec{F}_{visc} = -\alpha_l v_x \hat{x}$ (cf. chapitre 2.3).

3.4 Résultats en potentiel radio-fréquence

3.4.1 Potentiel radial isotrope

La dynamique obtenue dans le cas d'un potentiel rf avec $a_u = 0$ se résume en quatre phases temporelles successives. Tout d'abord, le nuage d'ions connaît une phase de refroidissement au terme de laquelle il forme un nuage plus dense, caractérisé par une forme dépendant du potentiel appliqué. Les températures atteintes dans la direction du laser varient entre 1 et 10 mK. La température T_y est peu refroidie et se situe entre 10 et 100 mK. Un exemple de l'évolution de ces températures se trouve en figure 3.13a. La figure 3.13b permet de suivre l'évolution de la dynamique dans le référentiel du centre de masse.

Pour des valeurs de α suffisamment petites ($\alpha \leq 10^{-3}$), pour lesquelles la structure stable attendue est une ligne, l'amplitude du mouvement dans la direction y est due à la température élevée et au mouvement du centre de masse comme cela était le cas en pseudo-potentiel. L'amplitude du mouvement des ions est toujours contenue dans un plan. Cependant, à la différence de la dynamique obtenue en pseudo-potentiel, ce plan n'est plus le plan statique (z, y) mais forme un angle oscillant à la fréquence rf avec ce dernier, dont l'axe de pivot est l'axe z . L'introduction d'un second laser contra-propageant supprime cette rotation oscillante du plan, sans modifier le comportement décrit dans la suite.

Après cette première phase de refroidissement, quelle que soit la valeur de α , l'amplitude du mouvement des ions augmente. Ce phénomène n'est pas observé en pseudo-potentiel et est attribué au chauffage rf. Dans le même temps, le champ radio-fréquence excite le mouvement du centre de masse dans la direction y dont l'amplitude augmente.

Dans une troisième phase de l'évolution temporelle, le mouvement du centre de masse s'amplifie dans la direction x , en dépit du refroidissement direct du laser. La vitesse de rotation du c.m. autour du centre du piège atteint alors la valeur moyenne ω_r . Ce comportement est apparent sur la figure 3.14. Le mouvement des ions dans le plan radial peut alors être décomposé en

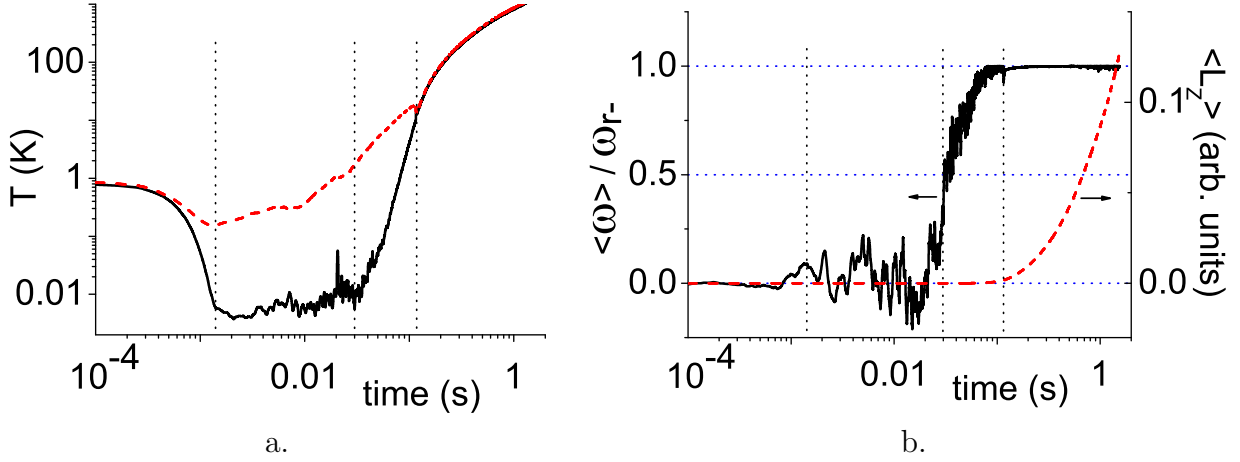


Figure 3.13 – a. Evolution des températures T_x (ligne noire) et T_y (tirets rouges) au cours du temps. b. Evolution de la vitesse angulaire moyenne du nuage $\langle \omega \rangle$ dans le référentiel du centre de masse rapporté à ω_r (ligne noire, axe de gauche) et du moment cinétique moyen $\langle L_z \rangle$ dans le référentiel du centre de masse (tirets rouges, axe de droite). Le système simulé est un ensemble de 70 ions dans un potentiel rf pour lequel $\alpha = 7 \times 10^{-4}$ et $q_u = 0,187$. Les traits noirs verticaux symbolisent les différentes phases de la dynamique décrites dans le texte.

un mouvement de rotation du c.m. autour du centre du piège, et un mouvement de rotation de l'ensemble du nuage autour de son centre de masse (voir figure 3.13b). Le sens de ces rotations est aléatoire d'une simulation à l'autre et nous avons vérifié que le défaut de "chiralité" varie en $1/\sqrt{N}$, où N est le nombre de simulations. Au cours de cette phase, la rotation des ions autour de leur c.m. s'accélère. Le taux de photons ré-émis connaît une forte baisse. Cela est dû au mouvement des ions qui décale la transition atomique par effet Doppler et entraîne le désaccord du laser très loin de la résonance, rendant le refroidissement Doppler inefficace.

La dernière phase de l'évolution a lieu lorsque la vitesse angulaire de rotation $\langle \omega \rangle$ atteint la valeur de la pulsation associée au pseudo-potentiel dans le plan radial ω_r . A partir de cet instant, la valeur de $\langle \omega \rangle$ reste constante. Le nuage connaît alors une expansion dans le plan radial qui conduit au déconfinement des ions. Ce comportement se traduit sur la figure 3.13b, dans laquelle la courbe du moment cinétique moyen calculé dans référentiel du c.m., $\langle L_z \rangle$, connaît une brusque augmentation lorsque le rapport $\langle \omega \rangle / \omega_r = 1$. Le c.m. lui-même est sujet à une rotation autour du centre du piège à la vitesse ω_r comme l'indique la figure 3.14.

Ce comportement se retrouve quel que soit le rapport d'aspect du potentiel, provoquant l'expulsion des ions hors du piège, et rendant la poursuite de l'étude impossible. Dans la suite, l'application d'un tension statique $V_{dc} \neq 0$ permet de supprimer la rotation.

3.4.2 Potentiel radial anisotrope

La rotation précédente peut être limitée et rendue négligeable par la superposition d'un potentiel statique V_{dc} au potentiel radio-fréquence. La figure 3.15 montre la décroissance de la vitesse angulaire moyenne calculée dans le référentiel du c.m. en fonction du potentiel statique appliqué, donné par la valeur du paramètre de Mathieu correspondant a_u . En pratique, un piège réel génère de façon naturelle un pseudo-potentiel radial anisotrope, du fait des multiples imperfections inhérentes à sa réalisation ou aux dépôts d'impuretés sur ses électrodes. Bien

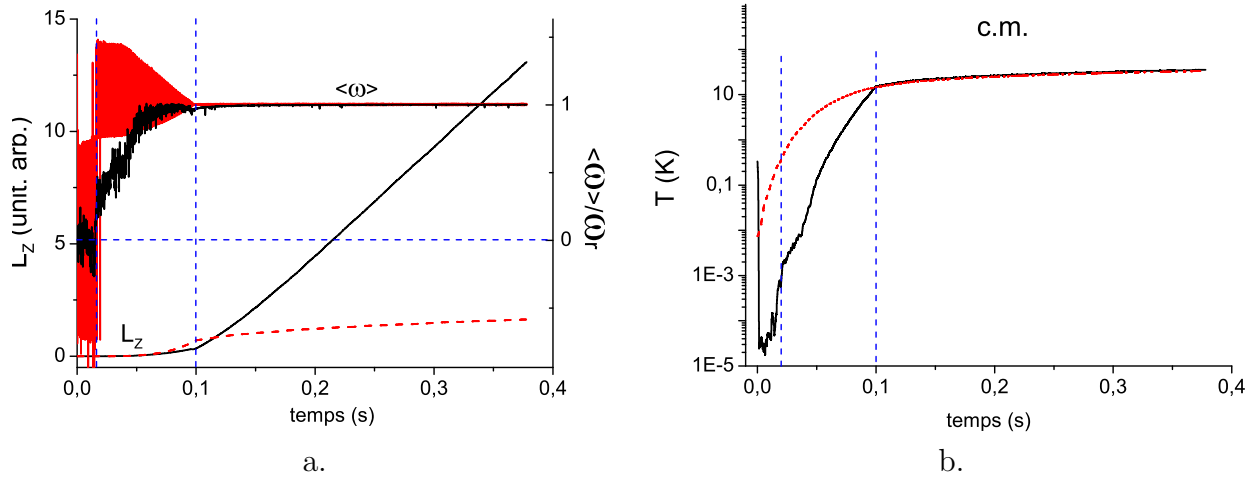


Figure 3.14 – (a) Vitesses angulaire de rotation $\langle\omega\rangle$ et moment cinétique L_z . Les courbes noires correspondent à la dynamique des ions mesurée dans le référentiel du c.m., les courbes en pointillés rouges correspondent à la dynamique du c.m. dans le référentiel du piège. (b) Energies cinétiques des composantes x (courbe noire) et y (pointillés rouges) du mouvement du c.m. dans le piège. Les tirets bleus verticaux délimitent les trois phases de la dynamique.

que l'anisotropie induite par un $a_u \neq 0$ conserve un haut degré de symétrie (par rapport aux anisotropies des pièges réels), la valeur du paramètre a_u pour laquelle la rotation devient négligeable est suffisamment faible pour être rencontrée dans les situations réelles et explique pourquoi la dynamique décrite en section 3.4.2, pour $a_u \neq 0$, n'est jamais observée.

Dans la suite, nous reprenons la valeur utilisée dans le cas du pseudo-potentiel $a_u = 7,805 \times 10^{-3}$, ce qui correspond à une tension de $V_{dc} = 10$ V. Pour cette valeur, la figure 3.15 montre que la vitesse de rotation résiduelle est négligeable. Il est alors possible de mesurer des températures stationnaires selon les trois directions de l'espace.

De même que pour le refroidissement Doppler, le rapport d'aspect du potentiel influence le chauffage rf à travers la répartition spatiale des ions dans le piège. Avec l'augmentation de α , les ions ont tendance à s'étendre dans le plan transverse où ils sont sujet à l'excitation radio-fréquence. De ce fait, la compétition entre refroidissement Doppler et chauffage rf ne garantit pas l'obtention d'un système froid. En pratique, nous observons un refroidissement systématique de l'échantillon pour $\alpha \leq 0,4$. Au-delà de cette valeur, notre échantillon de 15 simulations comporte de plus en plus de systèmes non refroidis à mesure que α augmente. Pour caractériser le refroidissement Doppler pour $\alpha > 0,4$, nous procédons de façon différente de ce qui a été fait jusqu'à présent. Nous commençons la simulation dans un potentiel de $\alpha < 0,4$, dans lequel le nuage est refroidi. Une fois le nuage froid, ω_z est augmenté de façon continue et suffisamment lente pour que la dynamique reste aussi proche que possible d'un état stationnaire. Nous suivons alors l'évolution du rapport des températures au cours du temps. Cette façon de procéder est légitime car elle s'avère être très proche d'un protocole expérimental réel, lorsque l'on désire réaliser des cristaux d'ions d'étendue importante dans la direction radiale.

Comme dans le cas du pseudo-potentiel lorsque $a_u \neq 0$, les températures T_x et T_y sont égales. Cependant, elles n'atteignent pas la limite Doppler (les paramètres choisis pour

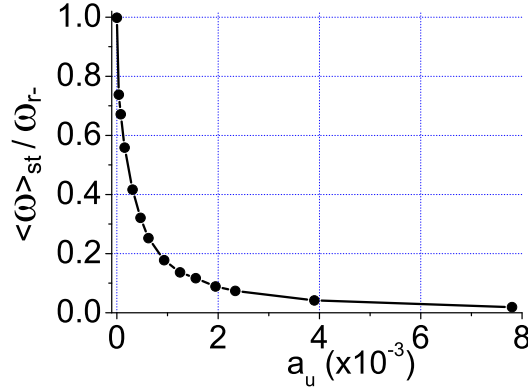


Figure 3.15 – Vitesse de rotation moyenne stationnaire $\langle \omega \rangle_{st}$ relative à ω_{r-} d'un système de 70 ions dans le potentiel rf de rapport d'aspect $\alpha = 7 \times 10^{-4}$ en fonction du paramètre de Mathieu a .

l'interaction laser permettent d'atteindre 1 mK au mieux) et se situent entre 1 et 100 mK, en fonction du rapport d'aspect et du nombre d'ions. L'efficacité du refroidissement Doppler pour $\alpha \leq 0,4$ est résumée sur la figure 3.16a. Le comportement du rapport T_z/T_x est très proche de celui obtenu en pseudo-potentiel dans le cas correspondant. L'apparition des différentes structures en fonction de α est similaire dans ces deux cas.

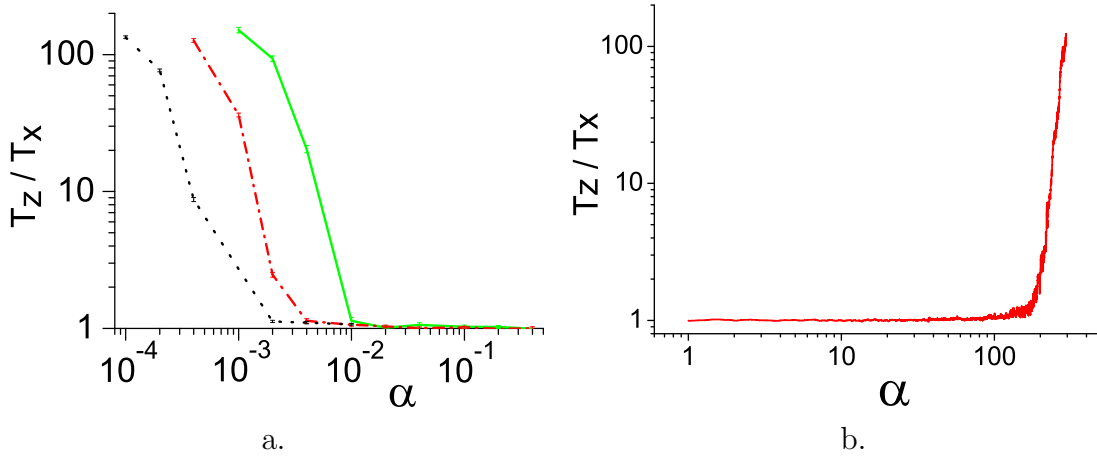


Figure 3.16 – (a) Rapport des températures T_z/T_x pour 35 ions (ligne verte), 70 ions (points-tirets rouges) et 140 ions (pointillés noirs) dans un potentiel rf anisotrope dont $a_u = 7,805 \times 10^{-3}$. (b) Rapport des températures T_z/T_x d'un système particulier de 70 ions obtenu en augmentant continûment α au cours du temps.

La figure 3.16b montre le comportement de T_z/T_x pour $\alpha > 0,4$ dans le cas d'un système de 70 ions. La courbe est en très bon accord avec celle obtenue en pseudo-potentiel (figure 3.9). L'évolution des structures est, elle aussi, identique au cas du pseudo-potentiel. Les ions ont tendance à se disposer en une configuration linéaire le long de l'axe v . Partant de $\alpha \simeq 1$, l'augmentation progressive du rapport d'aspect résulte en une hausse de la température du fait de l'étalement des ions dans le plan rf. Cependant, lorsque $\alpha \simeq 35$, la température subit une

forte baisse apparente sur la figure 3.17a. Celle-ci traduit la formation d'un cristal de Coulomb présenté en figures 3.17b et 3.17c. Les ions sont alors disposés selon l'axe v dans le plan radial, et de ce fait soumis au forçage rf.

L'augmentation du rapport T_z/T_x dû au découplage du mouvement des ions dans la direction z a lieu lorsque la structure devient une chaîne d'ions disposée sur l'axe v .

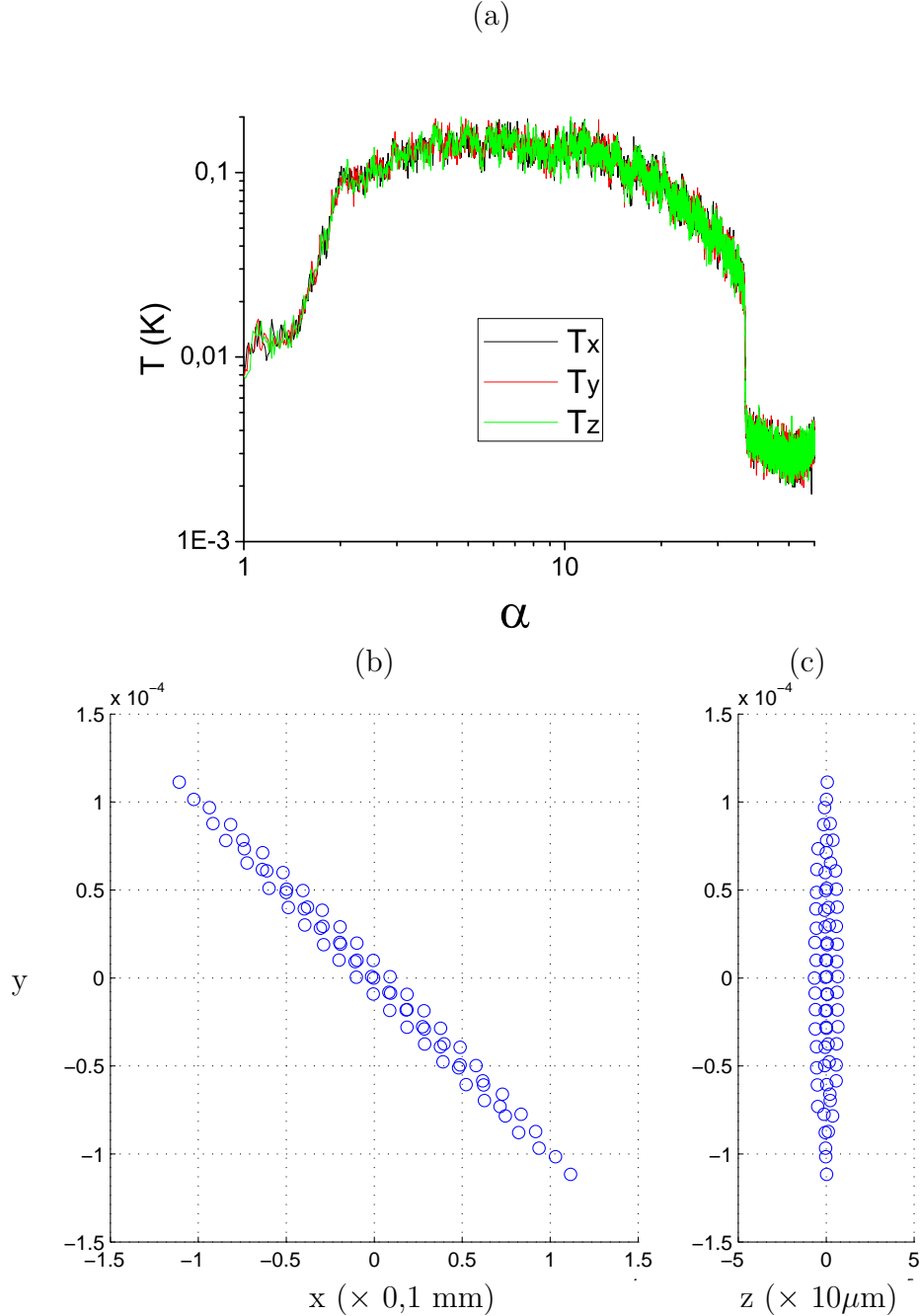


Figure 3.17 – (a) Températures d'un système de 70 ions dans un potentiel rf anisotrope dont $a_u = 7,805 \times 10^{-3}$. Toutes les températures connaissent une forte décroissance lorsque $\alpha \simeq 35$. (b) Image de la disposition des ions dans le plan transverse vu dans le repère cartésien (x horizontal, y vertical) pour cette valeur de α . La structure s'étend dans la direction v . (c) Disposition des ions dans le plan (y, z)

3.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons montré les limites de l'efficacité du refroidissement Doppler d'un nuage d'ions confiné dans un quadropôle linéaire. L'étude menée en pseudo-potentiel, aussi bien qu'en potentiel radio-fréquence, met en évidence la nécessité d'une extension tridimensionnelle de la structure d'ions pour un refroidissement effectif de l'ensemble des degrés de liberté des ions. Seul le centre de masse est refroidi uniquement selon les axes propres du piège possédant une projection non nulle du vecteur d'onde du faisceau laser.

Ce faisant, le cas du pseudo-potentiel nous a permis de mettre en évidence un phénomène de rotation lié à l'association d'un unique faisceau laser et d'un potentiel radial anisotrope. Cette anisotropie du potentiel radial conduit à la formation de nouvelles structures stables à basses températures, ainsi qu'à de nouvelles transitions de phases de seconde espèce.

Lors de la partie de l'étude réalisée en potentiel radio-fréquence, nous avons pu nous rendre compte de la nécessité de briser la symétrie discrète du potentiel dans le plan radial, afin d'obtenir le confinement du nuage d'ions dans le piège. Ceci est réalisé par l'emploi d'une très faible anisotropie générée par la superposition d'un potentiel statique additionnel sur les barreaux du piège, correspondant à un paramètre de Mathieu $a_u \neq 0$.

Nous avons finalement montré l'existence de structures cristallisées dont l'extension spatiale se situe dans le plan transverse, et subit donc le forçage du champ électrique rf de façon importante.

Chapitre 4

Organisation d'un petit nombre d'ions dans un $2k$ -pôle linéaire

L'objet de ce chapitre est d'exposer une étude effectuée sur les structures d'ions en anneau plan, conduite par le fil directeur d'une éventuelle application à la métrologie. Cette étude comporte une première partie analytique, permettant la détermination de conditions d'équilibre des structures d'ions, et une seconde partie numérique, donnant accès à la dynamique d'un anneau d'ions dans le potentiel rf d'un multipôle. Le lecteur intéressé par les performances attendues d'une horloge dont ce type de structure est le support de la fréquence étalon, ainsi que par les différents effets limitant sa précision et sa stabilité, peut se référer à l'article [96].

4.1 Introduction

Nous avons déjà évoqué, dans le chapitre 1, quelques-unes des propriétés des pièges multipolaires d'ordre supérieur à 2. La particularité qui va être mise à profit ici est que, à suffisamment basse température, le pseudo-potentiel qui leur est associé permet l'obtention de structures pour lesquelles la densité d'ions décroît au centre du piège. Lorsque le nombre d'ions est trop faible pour raisonner en terme de densité, il est possible d'utiliser la technique de la dynamique moléculaire, et ainsi tenir compte de chaque ion formant la structure, afin de remonter aux propriétés de cette dernière. Pour ces faibles nombres d'ions, les calculs numériques montrent que les structures formées sont des tubes d'ions, emboîtés les uns dans les autres, comme le montre la figure 4.1. La longueur des tubes, ainsi que leurs rayons, sont fonctions des potentiels de confinement et du nombre d'ions.

Lorsque le potentiel est fixé, un nombre d'ions plus faible conduit à une diminution du nombre des tubes internes. Ainsi, pour un nombre d'ions suffisamment faible, un unique tube est formé. Il se compose d'un alignement d'anneaux d'ions, positionnés en quinconce selon l'axe de symétrie du piège. La diminution du nombre d'ions conduit alors à une diminution du nombre d'anneaux. La structure minimale résulte en un unique anneau d'ions, disposé dans le plan $z = 0$.

Dans cette configuration, tous les ions sont soumis à la même intensité du champ électrique confinant, ce qui est un atout pour les applications nécessitant la prise en compte de l'effet Stark sur l'ensemble des ions. De plus, le champ radio-fréquence se situant uniquement dans le plan transverse, la direction longitudinale est favorable aux applications nécessitant un mouvement minimum des ions. Cette disposition permet de positionner les ions en des lieux d'égales intensités de champ laser (potentiellement d'un laser d'horloge), lorsque le faisceau de

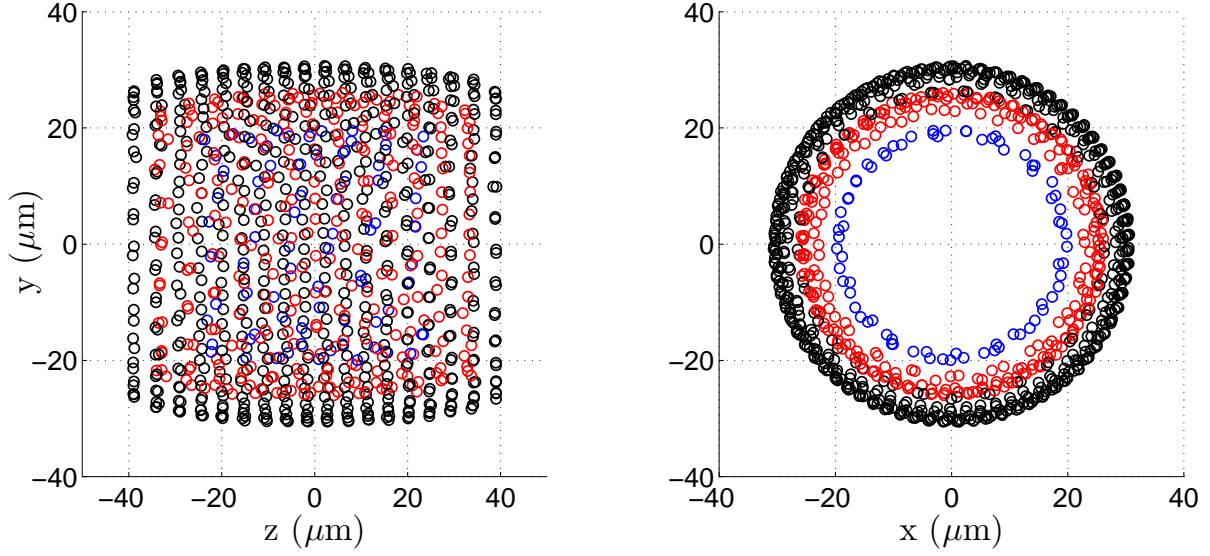


Figure 4.1 – Ensemble de 1000 ions calcium dans le pseudo-potential d'un octupôle linéaire. L'ensemble des ions est soumis au refroidissement Doppler, et la température atteint la limite Doppler selon chaque direction de l'espace. La structure est formée de trois tubes concentriques. Les couleurs permettent de différencier chaque tube.

ce dernier se propage selon l'axe de symétrie du piège.

Les particularités précédemment évoquées permettent d'envisager la possibilité d'étendre aux multipôles d'ordres supérieurs le domaine de la métrologie des fréquences optiques. Pour de telles applications, les pièges de Paul sont des outils de choix puisque l'ion peut être refroidi par laser jusqu'à la température limite Doppler. L'ion peut ainsi demeurer presque indéfiniment au centre du piège où les différents champs confinants sont théoriquement nuls. Les modifications de la transition atomique sondée dues à ces champs, qu'elles soient directes (effet Stark, etc...) ou indirectes (effet Doppler au second ordre dû au micro-mouvement par exemple), sont alors minimales.

Pour une application à la métrologie des fréquences, le système d'ions doit satisfaire à de sévères contraintes sur la dynamique de ses degrés de libertés externes comme internes. Celles-ci sont dictées par les exigences imposées aux horloges atomiques, à savoir leur précision et leur stabilité. Parmi les contraintes imposées, deux points fondamentaux concernent la structure d'ions.

Premier point : afin de pouvoir négliger l'élargissement de la transition d'horloge par effet Doppler au premier ordre, les ions doivent être confinés dans le régime de Lamb-Dicke, pour lequel la dispersion sur la position de l'ion selon la direction de propagation du laser d'horloge est inférieure à la longueur d'onde de ce dernier.

Second point : le décalage des niveaux d'énergie par effet Stark doit être évalué avec précision et doit conserver une valeur identique pendant le fonctionnement de l'horloge. L'effet Stark dépendant du champ local, il faut s'assurer que la position des ions reste la plus stable possible. Pour une structure en anneau plan, les ions sont disposés dans le plan $z = 0$, le champ de confinement axial est alors nul et seule la position radiale des ions importe. Trois causes majeures induisent une variation de la position radiale des ions. La première provient du mouvement forcé des ions dû au champ rf. L'amplitude de ce mouvement est proportionnelle

au champ électrique rf local. Une deuxième cause est l'agitation thermique des ions, qui induit une dispersion de leurs positions autour de la position d'équilibre. Une dernière cause résulte de la perte éventuelle d'un ion (par collision avec le gaz résiduel dans l'enceinte à vide par exemple) lors du fonctionnement de l'horloge. Cette diminution du nombre d'ions induit alors une variation du rayon d'équilibre des ions, résultant de la compétition entre le potentiel de confinement et le potentiel coulombien.

4.2 Equilibre d'un anneau d'ions dans un $2k$ -pôle

Dans cette première partie, nous considérons un régime de fonctionnement du piège rf dans lequel l'approche du pseudo-potentiel est valable. Nous pouvons alors étudier les propriétés statiques du confinement. Nous dérivons tout d'abord une contrainte sur les paramètres de piégeage permettant l'obtention, à basse température, d'une structure d'ions en anneau plan, i.e. dont tous les ions se situent dans le même plan ($z = 0$).

Dans l'optique d'une application à la métrologie des fréquences, nous déterminons dans un second temps une contrainte supplémentaire sur les paramètres de confinement, permettant un contrôle optimisé du rayon de l'anneau lors d'une éventuelle perte d'ions.

4.2.1 Obtention d'un anneau plan

Pour un nombre d'ions suffisamment élevé (mais insuffisant pour former deux couches dans la direction radiale), la configuration stable est un tube d'ions. Celui-ci est formé d'une succession d'anneaux alignés en quinconce selon l'axe z , comme le montre la figure 4.2a. En modifiant le nombre d'ions, et en adaptant les paramètres de piégeage (potentiel effectif de confinement radial $\propto V_{2k}^2$ et potentiel de confinement axial $\propto U_{dc}$ par exemple), le rayon du tube ainsi que sa longueur sont modifiables [45]. Il est alors possible de trouver des configurations pour lesquelles le tube se réduit à une structure en double anneau, comme c'est le cas sur la figure 4.2b.

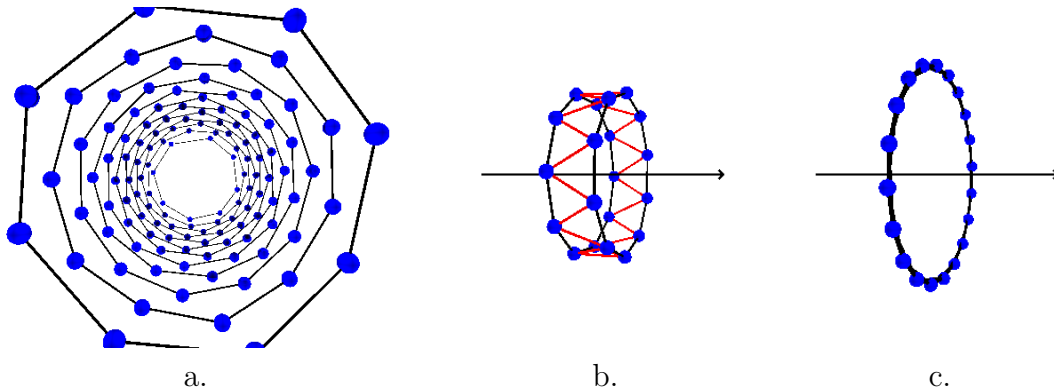


Figure 4.2 – (a) Vue en perspective selon l'axe z d'une structure de 126 ions calculée à l'aide d'un thermostat à 10 mK dans le pseudo-potentiel d'un octupôle linéaire. Avec le potentiel choisi, la structure obtenue est un tube d'ions formé de 12 anneaux. Tous les anneaux comportent onze ions, à l'exception des anneaux formant les deux extrémités du tube qui en comptent huit. (b) Tube formé de 2 anneaux, les traits rouges permettent de mieux visualiser la position relative des ions. (c) Un unique anneau d'ions. L'axe noir représente la direction longitudinale du piège (z)

La distance entre les deux anneaux résulte de l'équilibre entre la force coulombienne qui tend à les éloigner l'un de l'autre, et la force de confinement axial ($\propto U_{dc}$), qui tend à faire converger chacun d'eux vers le centre du piège. Cette distance d'équilibre peut être changée en modifiant le rapport de ces deux forces. Si le nombre d'ions ainsi que le rayon des anneaux sont fixés, l'intensité de la force de répulsion coulombienne s'exerçant entre les anneaux est uniquement fonction de leur distance relative.

Nous pouvons alors agir sur le potentiel de confinement axial U_{dc} pour modifier la distance relative des anneaux. Diminuer U_{dc} de façon mesurée permet d'augmenter cette distance. Cependant, une importante diminution de U_{dc} aura pour effet de changer de façon radicale la configuration minimisant l'énergie potentielle, et la structure en deux anneaux sera perdue. À l'inverse, augmenter U_{dc} permet de rapprocher les deux anneaux. Il existe en fait une valeur minimale de ce potentiel pour laquelle la distance entre les deux anneaux devient nulle. On obtient alors une configuration en un unique anneau situé dans le plan $z = 0$, représenté sur la figure 4.2c. Cependant, modifier U_{dc} n'est pas sans conséquence sur le rayon de l'anneau, puisque ce potentiel génère une composante déconfinante dans le plan radial. Dans cette première partie, où nous nous intéressons aux propriétés statiques dans la direction z , nous devons garder à l'esprit que modifier U_{dc} en conservant le rayon de l'anneau constant, implique une modification du potentiel rf en compensation.

Nous cherchons l'expression du potentiel coulombien d'une structure en double anneau (cf. figure 4.2b), constituée d'un nombre pair d'ions N_p , idéalement disposés en quinconce, de part et d'autre, et à égale distance du plan $z = 0$. Se limiter à un nombre pair d'ions permet de ne traiter que les systèmes symétriques pour lesquels deux ions consécutifs ne peuvent se trouver du même côté du plan $z = 0$, cela simplifiant le traitement analytique. Le double anneau est représenté en fig. 4.3, où les ions sont alternativement devant et derrière le plan $z = 0$, aux positions $\vec{z} = +z_a \hat{z}$ et $\vec{z} = -z_a \hat{z}$.

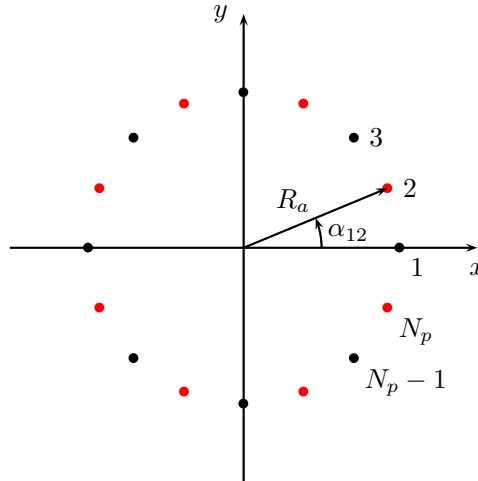


Figure 4.3 – Figure de l’anneau vu selon \hat{z} . Les deux couleurs partagent les ions situés de part et d’autre du plan $z = 0$.

Notons l'énergie potentielle coulombienne du double anneau U_C :

$$U_C = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N_p-1} \sum_{j=i+1}^{N_p} \frac{1}{d_{ij}} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N_p}{2} \sum_{j=2}^{N_p} \frac{1}{d_{1j}} \quad (4.1)$$

où d_{ij} est la distance entre les ions i et j . La dernière égalité s'obtient en remarquant que le système est symétrique sous rotation de $\delta\alpha = 2\pi/N_p$. Ceci implique que toutes les particules se situent en des points de même valeur de l'énergie potentielle coulombienne, que nous exprimons arbitrairement en fonction de la particule 1 de la façon suivante :

$$x_j - x_1 = R_a (\cos(\alpha_{1j}) - 1) \quad (4.2)$$

$$y_j - y_1 = R_a \sin(\alpha_{1j}) \quad (4.3)$$

$$z_j - z_1 = \begin{cases} 2 z_a & \text{si } j \text{ pair} \\ 0 & \text{si } j \text{ impair} \end{cases} \quad (4.4)$$

où $\alpha_{ij} = (j - i) 2\pi/N_p$ est l'angle dans le plan radial séparant les ions i et j , z_a est la distance d'un ion au plan $z = 0$ et R_a est le rayon de l'anneau. La parité de j détermine la position de l'ion par rapport au plan $z = 0$. Effectuant les changements de variables $j \mapsto 2p$ dans le cas pair et $j \mapsto 2p - 1$ dans le cas impair, nous obtenons l'expression de la distance d'un ion j à l'ion 1 :

$$d_{1(2p)} = \sqrt{2 R_a^2 (1 - \cos(\alpha_{1(2p)})) + 4z_a^2} = 2 \sqrt{R_a^2 \sin^2(\alpha_{1(2p)}/2) + z_a^2} \quad (4.5)$$

$$d_{1(2p-1)} = \sqrt{2 R_a^2 (1 - \cos(\alpha_{1(2p-1)}))} = 2 R_a |\sin(\alpha_{1(2p-1)}/2)| \quad (4.6)$$

L'énergie potentielle de l'anneau due à l'interaction coulombienne s'écrit donc :

$$U_C = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N_p}{4} \left(\sum_{p=1}^{N_p/2} \frac{1}{\sqrt{R_a^2 \sin^2((2p-1)\pi/N_p) + z_a^2}} + \sum_{p=2}^{N_p/2} \frac{1}{R_a \sin((p-1)2\pi/N_p)} \right) \quad (4.7)$$

Le premier terme apparaissant entre les parenthèses représente, pour le système en double anneau, la contribution inter-anneaux à l'énergie potentielle qui, à N_p et R_a fixés, ne dépend que de la distance relative, $2z_a$, des anneaux. Le second terme correspond à l'énergie coulombienne intra-anneau de la structure en double anneau. Nous cherchons maintenant l'énergie potentielle nécessaire au confinement d'une telle structure. Le pseudo-potentiel $\Psi_{(2k)l}$ d'un piège linéaire $2k$ -polaire, selon notre convention (cf. chapitre 1), et lorsqu'aucun potentiel statique n'est superposé aux électrodes rf, s'exprime par :

$$\Psi_{(2k)l}(r, z) = \frac{k^2}{4} \frac{q_e^2 V_{2k}^2}{m r_0^2 \Omega^2} \left(\frac{r}{r_0} \right)^{2k-2} - \frac{q_e U_{dc}}{2 z_0^2} (r^2 - 2z^2) \quad (4.8)$$

Ce potentiel ne dépend que des variables r et z , et reste invariant sous changement $z \mapsto -z$. La contribution du pseudo-potentiel à l'énergie potentielle de la structure en double anneau sera donc N_p fois celle d'une particule arbitraire :

$$U_\Psi(R_a, z_a) = N_p \left(\frac{k^2}{4} \frac{q_e^2 V_{2k}^2}{m r_0^2 \Omega^2} \left(\frac{R_a}{r_0} \right)^{2k-2} - \frac{q_e U_{dc}}{2 z_0^2} (R_a^2 - 2z_a^2) \right) \quad (4.9)$$

Nous traçons en figure 4.4 les différentes contributions dans la direction longitudinale à l'énergie potentielle des configurations en deux anneaux et un unique anneau. Dans cette figure, le potentiel coulombien U_C est identique pour les deux configurations, car R_a et N_p sont identiques, mais le potentiel de confinement U_Ψ est différent. Dans la figure 4.4a, le potentiel de confinement axial ($\propto U_{dc}$) est suffisamment faible pour que le potentiel total possède deux minima (de part

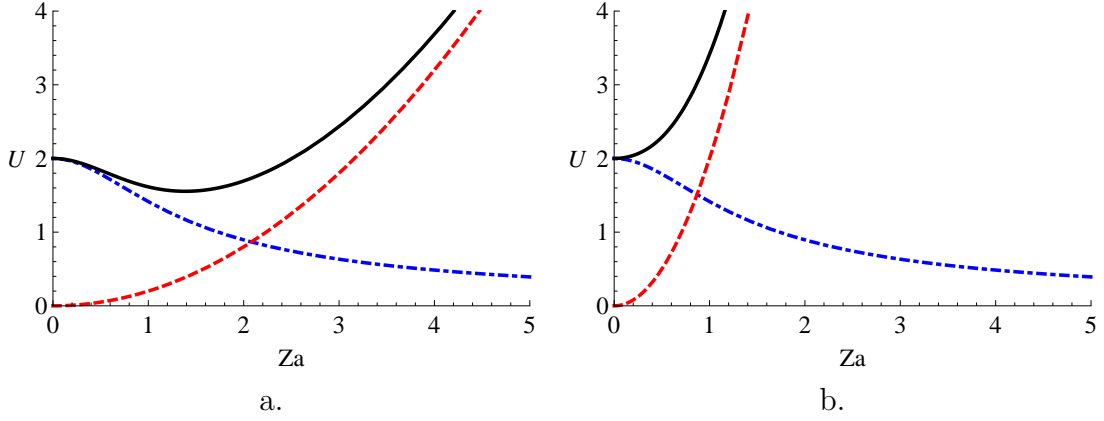


Figure 4.4 – Dépendance axiale de l'énergie potentielle dans le cas d'une configuration stable en double anneau (fig. a) et en unique anneau (fig. b), en fonction de la distance z_a des anneaux au plan de symétrie du piège ($z = 0$). Le potentiel coulombien U_C (points-tirets bleu) est identique dans les deux cas (car R_a et N_p sont identiques pour les deux figures), mais le potentiel de confinement U_Ψ (tirets rouges) est différent, et conduit à l'existence de deux minima (fig. a) ou un unique minimum (fig. b) de l'énergie potentielle totale (ligne continue noire). Les unités sont arbitraires.

et d'autre du plan $z = 0$) et conduit à une configuration en double anneau. Dans la figure 4.4b, la valeur du potentiel U_{dc} est suffisamment importante pour engendrer un unique minimum dans le potentiel total, en $z = 0$, et conduit à une structure d'équilibre en un unique anneau.

Afin d'obtenir une condition sur l'équilibre dans la direction \hat{z} , nous imposons à l'énergie potentielle totale $U = U_C + U_\Psi$ d'être minimale pour la position d'équilibre z_a :

$$\left. \frac{\partial U}{\partial z} \right|_{z_a} = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N_p}{4} \sum_{p=1}^{N_p/2} \frac{z_a}{(R_a^2 \sin^2((2p-1)\pi/N_p) + z_a^2)^{3/2}} + N_p \frac{2q_e U_{dc}}{z_0^2} z_a = 0 \quad (4.10)$$

Nous obtenons la contrainte à appliquer sur le potentiel U_{dc} pour que deux anneaux de rayons R_a soient séparés d'une distance $2z_a$:

$$U_{dc} = \frac{z_0^2}{8} \frac{q_e}{4\pi\epsilon_0} \sum_{p=1}^{N_p/2} \frac{1}{(R_a^2 \sin^2((2p-1)\pi/N_p) + z_a^2)^{3/2}} \quad (4.11)$$

Ainsi, à N_p et R_a fixés, augmenter la tension U_{dc} permet de rapprocher les deux anneaux. Nous déterminons la tension minimale à appliquer pour obtenir un unique anneau dans le plan $z = 0$ en imposant une distance relative z_a nulle dans l'équation précédente :

$$U_{dc} \geq \frac{z_0^2}{8} \frac{q_e}{R_a^3 4\pi\epsilon_0} \sum_{p=1}^{N_p/2} \frac{1}{\sin^3((2p-1)\pi/N_p)} \quad (4.12)$$

où les N_p ions se situent à la distance R_a du centre du piège. Seule l'égalité est rigoureusement solution de l'équation (4.11) pour $z_a = 0$, cependant, l'augmentation de U_{dc} ne peut physiquement conduire à une structure différente de l'anneau. Ainsi, nous obtenons, à potentiel U_{dc} fixé, le rayon critique R_{crit} en dessous duquel la configuration en un unique anneau n'est pas la

configuration d'énergie potentielle minimale :

$$R_{\text{crit}}^3 = \frac{z_0^2}{2q_e U_{dc}} \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{4} \sum_{p=1}^{N_p/2} \frac{1}{\sin^3((2p-1)\pi/N_p)} \quad (4.13)$$

$$= \frac{q_e^2/4\pi\epsilon_0}{m \omega_z^2} \frac{1}{4} \sum_{p=1}^{N_p/2} \frac{1}{\sin^3((2p-1)\pi/N_p)} \quad (4.14)$$

où $\omega_z^2 = 2q_e U_{dc}/(m z_0^2)$ est la pulsation caractéristique du potentiel de confinement axial. Nous pouvons estimer la somme apparaissant dans le second membre de l'équation. Remarquant que l'argument du sinus parcourt une demi-période (de π/N_p à $(N_p-1)\pi/N_p$) et que dans cette somme, les termes qui apportent la plus importante contribution sont ceux pour lesquels le sinus est minimal, nous pouvons faire l'approximation suivante :

$$\sum_{p=1}^{N_p/2} \sin^{-3}((2p-1)\pi/N_p) \simeq 2 \left(\frac{N_p}{\pi}\right)^3 \sum_{p=1}^{N_p/4} \frac{1}{(2p-1)^3} \simeq 2 \left(\frac{N_p}{\pi}\right)^3 \quad (4.15)$$

La dernière égalité s'obtient en remarquant que la somme sur N_p est approximativement égale à 1, comme le montre la figure 4.5a. La figure 4.5b montre que cette approximation est satis-

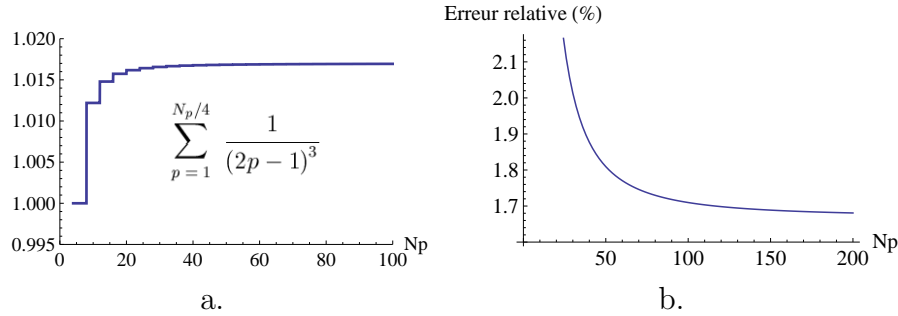


Figure 4.5 – (a) Comportement de la somme en fonction de sa borne N_p . (b) Erreur commise par l'approximation linéaire du rayon critique R_{crit} , en fonction du nombre d'ions.

faisante lorsque le nombre d'ions dépasse la trentaine. L'erreur commise est alors inférieure à 2% et le rayon critique varie linéairement avec le nombre d'ions. Son expression peut alors être approchée par :

$$R_{\text{crit}} \simeq \left(\frac{q_e^2/4\pi\epsilon_0}{2 m \omega_z^2} \right)^{1/3} \frac{N_p}{\pi} \quad (4.16)$$

L'obtention de cette expression fait abstraction de l'aspect dynamique imposé par le potentiel rf, ainsi que de la température non-nulle des ions. De ce fait, la limite réelle peut s'avérer supérieure à cette valeur théorique. Ce rayon critique R_{crit} constitue cependant un ordre de grandeur valable et permet d'obtenir une loi d'échelle.

4.2.2 Le minimum du pseudo-potentiel comme rayon d'équilibre

Dans la perspective d'un contrôle complet du système, nous souhaitons que le rayon d'équilibre de l'anneau plan soit très peu dépendant des fluctuations du nombre d'ions. Ceci

permet de limiter les effets systématiques dans le but d'optimiser la stabilité d'une horloge. La stratégie choisie est de rendre l'interaction coulombienne négligeable comparée à la force de confinement du piège. Dans ces conditions, les ions se disposent sur le rayon minimisant le pseudo-potential, R_{\min} . La résultante des forces inter-ioniques sur un ion de l'anneau parfaitement plan est exclusivement radiale, et tend à expulser les ions hors du piège. De ce fait, comme le montre le schéma en figure 4.6, le rayon d'équilibre de l'anneau, R_a , est toujours supérieur d'un écart δr au rayon minimisant le pseudo-potential. Ce rayon, R_{\min} , est donné par

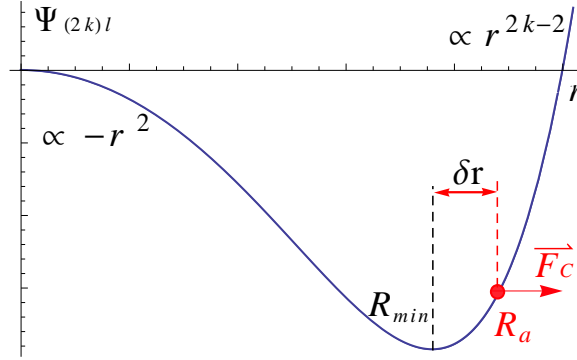


Figure 4.6 – Pseudo-potential du piège dans le plan $z = 0$. Le rayon d'équilibre d'un ion subissant la force coulombienne (en rouge) est supérieur au rayon minimisant le pseudo-potential (tirets noirs).

(cf. chapitre 1) :

$$R_{\min}^{2k-4} = \frac{r_0^{2k-2}}{k^2(k-1)} \frac{m r_0^2 \Omega^2}{q_e^2 V_{2k}^2} \frac{2q_e U_{dc}}{z_0^2} = \frac{r_0^{2k-4}}{k^2(k-1)} \frac{m^2 r_0^4 \Omega^2 \omega_z^2}{q_e^2 V_{2k}^2} \quad (4.17)$$

Nous admettons maintenant que le rayon de l'anneau est supérieur au rayon critique, $R_a > R_{\text{crit}}$. De ce fait, les ions sont supposés parfaitement disposés dans la plan $z = 0$. Par un raisonnement identique au précédent, nous écrivons l'énergie potentielle résultant de l'interaction coulombienne des ions situés à la distance R_a du centre du piège :

$$U_C(R_a) = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 R_a} \frac{N_p \Sigma(N_p)}{4} \quad \text{où} \quad \Sigma(N_p) = \sum_{j=1}^{N_p-1} \frac{1}{\sin(j\pi/N_p)} \quad (4.18)$$

Nous dérivons directement la condition d'équilibre sur le rayon de l'anneau R_a en minimisant l'énergie potentielle totale $U = U_C + U_\Psi$:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial r} \right|_{R_a} = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 R_a^2} \frac{N_p \Sigma(N_p)}{4} + N_p \left((2k-2) \frac{k^2}{4} \frac{q_e^2 V_{2k}^2}{m r_0^2 \Omega^2} \frac{R_a^{2k-3}}{r_0^{2k-2}} - \frac{q_e U_{dc}}{z_0^2} R_a \right) = 0 \quad (4.19)$$

Remplaçant R_a par la variable r , nous obtenons un polynôme $P(r)$ pour lequel $P(R_a) = 0$:

$$P(r) = (2k-2) \frac{k^2}{4} \frac{q_e^2 V_{2k}^2}{m r_0^{2k} \Omega^2} r^{2k-1} - \frac{q_e U_{dc}}{z_0^2} r^3 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\Sigma(N_p)}{4} \quad (4.20)$$

Nous souhaitons maintenant que le rayon de l'anneau R_a soit égal au rayon de minimum de potentiel du piège R_{\min} , à un infime décalage r_c près, dû à l'interaction coulombienne :

$$R_a = R_{\min} + r_c \quad (4.21)$$

Ainsi, nous traitons volontairement l'interaction coulombienne comme une perturbation sur la position d'équilibre R_{\min} :

$$P(R_a) = P(R_{\min}) + r_c \frac{dP}{dr} \Big|_{R_{\min}} + \mathcal{O}(r_c^2) = 0 \quad (4.22)$$

Dans le but d'obtenir une majoration de r_c , nous montrons que $\mathcal{O}(r_c^2) > 0$.

$$\mathcal{O}(r_c^2) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(r_c)^n}{n!} \frac{d^n P}{dr^n} \Big|_{R_{\min}} \quad (4.23)$$

Posons, pour simplifier les notations : $P(r) = \alpha r^{2k-1} - \beta r^3 - \gamma$, où les constantes α , β et γ sont positives et s'identifient facilement à l'aide de l'équation (4.20). Avec ces notations, le rayon du minimum de potentiel du piège s'écrit $R_{\min}^{2k-4} = \beta/\alpha$. Après un peu de mise en forme, nous pouvons écrire :

$$\frac{d^n P}{dr^n} = \frac{(2k-1)!}{[(2k-1)-n]!} \alpha r^{(2k-1)-n} - \frac{3!}{(3-n)!} \beta r^{3-n} \quad (4.24)$$

Cette expression étant valable à tout ordre n à la condition que $r \neq 0$ lorsque $n > 3$. Cette condition est remplie puisque le rayon de l'anneau ne peut être nul. Il suit :

$$\frac{d^n P}{dr^n} \Big|_{R_{\min}} = \left[\frac{(2k-1)!}{[(2k-1)-n]!} - \frac{3!}{(3-n)!} \right] \beta R_{\min}^{3-n} > 0, \quad \forall k > 2 \quad (4.25)$$

La forme de l'équation (4.23) implique alors que $\mathcal{O}(\delta r^2)$ est positif. De plus, par définition du rayon R_{\min} , nous avons :

$$P(R_{\min}) = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\Sigma(N_p)}{4} = -\gamma \quad (4.26)$$

Nous ré-écrivons l'équation (4.22) de façon explicite :

$$P(R_a) = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\Sigma(N_p)}{4} + r_c [2k-4] \frac{q_e U_{dc}}{z_0^2} R_{\min}^2 + \mathcal{O}(r_c^2) \quad (4.27)$$

Utilisant le fait que le polynôme $P(r)$ est nul en $r = R_a$, et que $\mathcal{O}(r_c^2) > 0$, nous obtenons une majoration de l'écart de la position d'équilibre de l'anneau au rayon minimisant le pseudo-potentiel :

$$r_c < \frac{1}{(k-2)} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\Sigma(N_p)}{4} \right) \frac{z_0^2}{2q_e U_{dc} R_{\min}^2} = \frac{R_{\min}}{k-2} \frac{U_c(R_{\min})}{N_p m \omega_z^2 R_{\min}^2} \quad (4.28)$$

Prenant pour valeur de r_c sa borne supérieure, nous pouvons déterminer l'effet de la perte d'un ion sur le rayon d'équilibre de l'anneau. Dans l'expression précédente, la dépendance en nombre d'ions est donnée par :

$$\Sigma(N_p) = 2 \sum_{j=1}^{N_p/2} \frac{1}{\sin(j\pi/N_p)} \approx \frac{2N_p}{\pi} \sum_{j=1}^{N_p/2} \frac{1}{j} \approx \frac{2}{\pi} N_p \ln(N_p) \quad (4.29)$$

La variation relative maximale entraînée par la perte d'un ion est alors donnée par :

$$\frac{\delta r_c}{r_c} = \frac{\ln(N_p) + 1}{N_p \ln(N_p)} \approx \frac{1}{N_p} \quad (4.30)$$

La variation du rayon d'équilibre de l'anneau induite par la perte d'un ion est donc :

$$\delta R_a = \delta r_c \approx r_c / N_p \approx \frac{1}{(k-2)} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\ln(N_p)}{2\pi} \right) \frac{z_0^2}{2q_e U_{dc} R_{\min}^2} \quad (4.31)$$

A R_{\min} fixé, la variation du rayon de l'anneau est proportionnelle à $\ln(N_p)$. Bien que le rayon du minimum de potentiel, R_{\min} , n'ait pas de dépendance explicite en nombre d'ions, la contrainte de l'obtention d'un anneau plan impose une valeur minimale égale à R_{crit} , cette limite étant elle-même linéaire en N_p (cf. équation (4.16)). Ainsi, si nous recherchons une configuration adéquate pour une application à la métrologie, nous devons considérer que la variation du rayon lors de la perte d'un ion se comporte en $\delta R_a \propto \ln(N_p) / N_p^2$.

Cette variation éventuelle a des conséquences sur la stabilité de l'horloge. Ces conséquences ont été estimées par C. Champenois dans [96], et s'avèrent être acceptables pour les configurations que nous obtenons par la suite.

4.3 Aspect dynamique du confinement

Dans la section précédente, nous avons uniquement considéré l'aspect statique du confinement. En plus des contraintes imposées par les conditions d'équilibres, nous devons prendre en compte l'aspect dynamique engendré par le potentiel radio-fréquence, ainsi que la température non-nulle des ions. Dans ce but, nous effectuons des simulations numériques de dynamique moléculaire, utilisant le potentiel rf idéal d'un octupôle linéaire comme exemple représentatif des multipôles d'ordre supérieurs.

4.3.1 Influence de la structure d'équilibre sur le refroidissement

Au chapitre précédent, nous avons effectué une étude du refroidissement Doppler de différentes structures d'ions dans le potentiel d'un quadrupôle linéaire. A cette occasion, nous avons mis en évidence l'influence de la morphologie des structures sur le refroidissement. Nous avons montré que pour certaines structures, l'interaction coulombienne ne permet pas le couplage des différentes directions du mouvement des ions, rendant les transferts thermiques entre ces différentes directions impossible. Ce comportement se traduit, à cette occasion, par l'inefficacité du refroidissement Doppler à diminuer l'énergie cinétique des ions sur les directions qui ne sont pas couplées de façon directe à la direction de propagation du laser de refroidissement.

Dans le potentiel quadrupolaire du chapitre précédent, deux types de structures d'ions manifestent un tel comportement. Le premier type, obtenu pour de faibles valeurs de ω_z comparativement au potentiel de confinement radial, sont des structures en chaînes, où les ions sont disposés en ligne sur l'axe de symétrie du piège, et pour lesquelles toutes les directions sont découplées les unes des autres. Le second type de structures, obtenu pour de grandes valeurs de ω_z , sont des disques s'étalant dans le plan $z = 0$, et pour lesquels seule la direction longitudinale est découplée des deux directions transverses.

Dans le potentiel des pièges multipolaires linéaires d'ordres supérieurs, les structures possédant cette propriété de découplage des composantes du mouvement des ions sont les structures formées d'un unique anneau plan. Pour celles-ci, la direction longitudinale est découplée des deux directions du plan transverse. Cette propriété peut être mise à profit pour refroidir la composante longitudinale du mouvement, laquelle n'est pas soumise au forçage rf, jusqu'à la température limite Doppler lorsqu'un laser de refroidissement se propage selon cette direction.

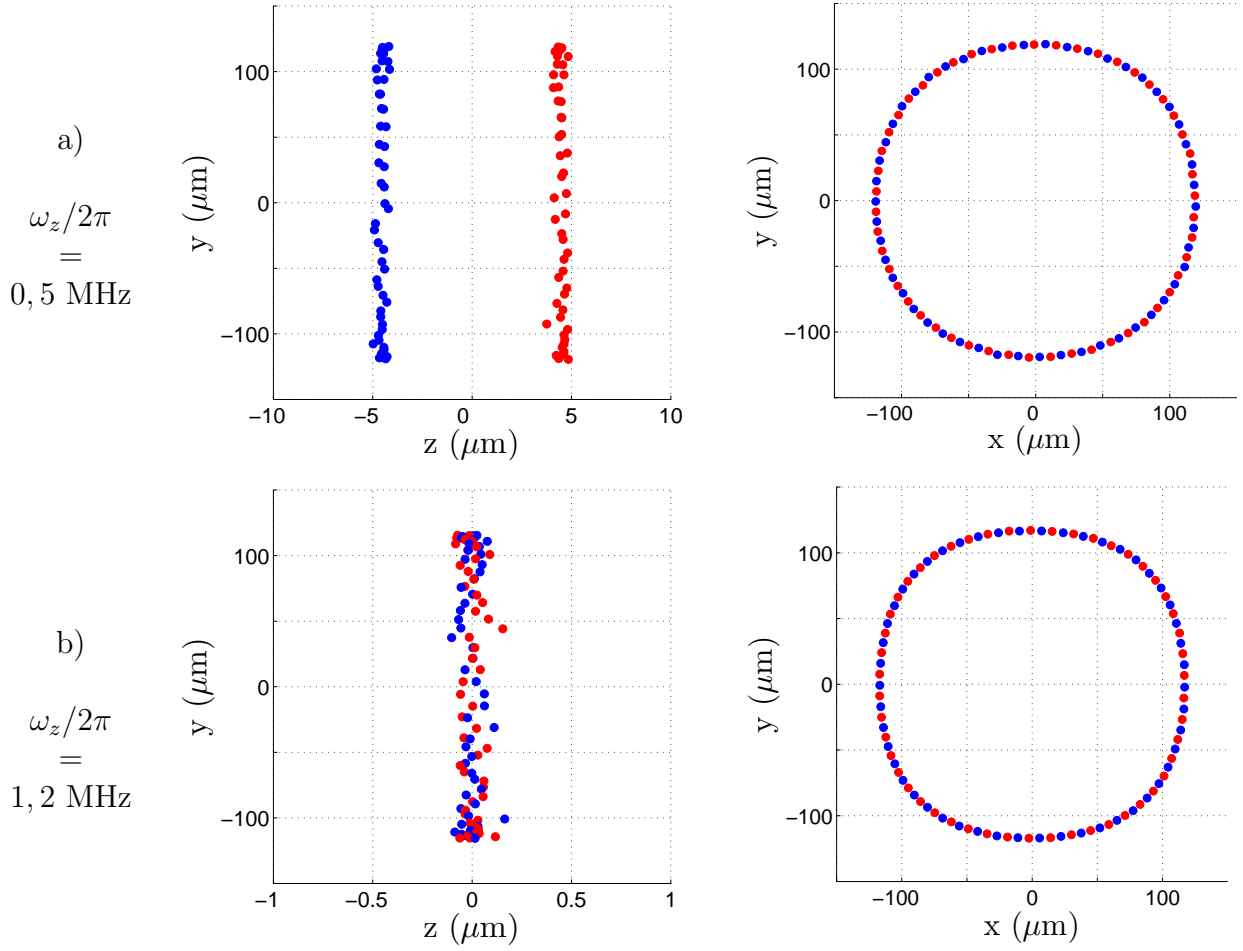


Figure 4.7 – Images des positions instantanées d’un ensemble de 100 ions calcium refroidis par laser dans le potentiel rf d’un octupôle linéaire. Le potentiel V_8 est choisi de façon à ce que les ions soient disposés sur le rayon minimisant le pseudo-potential $R_{\min} = 120 \text{ } \mu\text{m}$. Les structures obtenues forment (a) une structure en double anneau pour $\omega_z/2\pi = 0,5 \text{ MHz}$ et (b) une structure en un unique anneau plan pour $\omega_z/2\pi = 1,2 \text{ MHz}$. Les couleurs séparent les ions initialement disposés à gauche du plan $z = 0$ de ceux initialement à droite de ce plan.

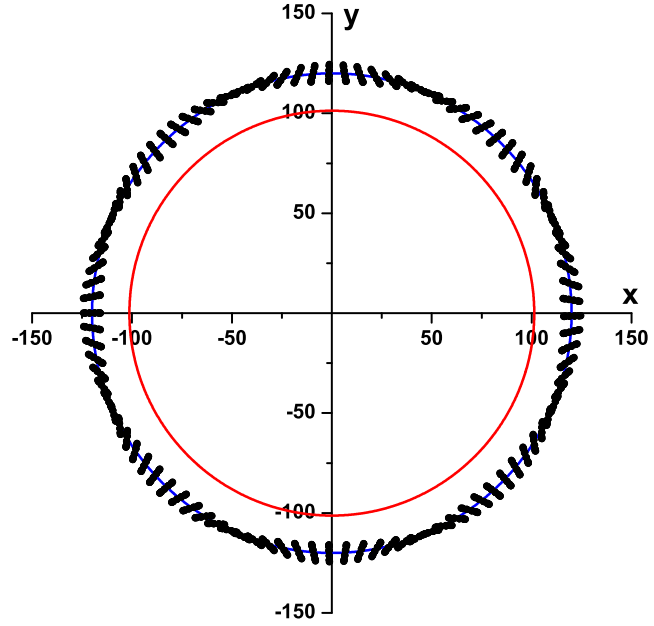
Afin de le mettre en évidence, nous réalisons une simulation dont les conditions initiales sont telles qu’un ensemble de cent ions forme une structure en double anneau, qui est refroidie par laser selon chaque direction de l’espace. Une image des positions instantanées initiales est donnée en figure 4.7a. La distance moyenne séparant les anneaux est $2z_a \simeq 9 \text{ } \mu\text{m}$. La fréquence de confinement axial est alors $\omega_z/2\pi = 0,5 \text{ MHz}$, et le potentiel de confinement radial, V_8 , est tel que les ions sont disposés sur le rayon minimisant le pseudo-potential à $R_{\min} = 120 \text{ } \mu\text{m}$. Pour ce nombre d’ions et cette valeur de ω_z , le rayon théorique minimal permettant l’obtention d’un unique anneau plan est $R_{\text{crit}} = 181 \text{ } \mu\text{m}$ (cf. équation (4.16)), justifiant la configuration en double anneau. Le paramètre d’adiabaticité à la position d’équilibre des ions prend la valeur $\eta_{ad}(R_{\min}) \simeq 0,09$, qui est inférieure à la limite empirique d’adiabaticité ($\simeq 0,36$) et permet la description du système par l’approche du pseudo-potential (cf. chapitre 1). Les deux couleurs utilisées distinguent les ions situés initialement du côté $z < 0$ (en bleu) de ceux situés du côté $z > 0$ (en rouge), et permettent de visualiser le positionnement des ions en quinconce sur le

cercle formé dans le plan transverse (xOy).

Partant de cette configuration initiale, le potentiel de confinement axial est progressivement augmenté jusqu'à la fréquence $\omega_z/2\pi = 1,5$ MHz en 80 ms. Le potentiel V_8 est ajusté à chaque instant (augmenté pour lutter contre l'effet déconfinant de ω_z dans le plan radial) de façon à conserver la valeur de R_{\min} constante. L'augmentation de ω_z a pour effet de diminuer la valeur théorique du rayon critique ($R_{\text{crit}} \propto 1/\omega_z^{2/3}$), au-dessus duquel la configuration stable est un unique anneau. Ainsi, la position radiale d'équilibre des ions étant fixée à $R_{\text{crit}} = 120 \mu\text{m}$, la diminution du rayon critique permet de faire converger la structure en double anneau vers celle en anneau plan.

La figure 4.7b montre la structure en anneau plan obtenue pour une fréquence un peu inférieure à $\omega_z/2\pi = 1,2$ MHz. Les ions, initialement situés du côté $z < 0$ (bleu) et $z > 0$ (rouge), sont maintenant répartis de façon aléatoire selon l'axe z . Le rayon de l'anneau formé dans le plan radial est resté identique. Cependant, on remarque que la courbure de l'anneau est imparfaite. Cela est dû au fait que les images de la figure 4.7 correspondent aux instants pour lesquels l'amplitude du champ rf est maximale ($\cos(\Omega t) = 1$).

Figure 4.8 – Mouvement des 100 ions formant un unique anneau plan de rayon $120 \mu\text{m}$, lors d'une période rf. La fréquence caractéristique de confinement axial est $\omega_z = 1,2$ MHz. Le cercle rouge représente le rayon minimal théorique permettant l'obtention de l'anneau plan. Le cercle bleu en arrière plan, derrière la position des ions, décrit le rayon minimisant le pseudo-potentiel, R_{\min} . Les longueurs sont exprimées en microns.



La déviation de la forme circulaire est due à l'augmentation de l'amplitude du micro-mouvement causée par l'augmentation du potentiel V_8 nécessaire pour maintenir R_{\min} constant. La convention adoptée pour le potentiel radio-fréquence $\Phi_{8\text{rf}}$ place les huit électrodes générant le champ, selon les directions des axes du repère cartésien ainsi que selon les diagonales du repère. Les positions rapportées en figure 4.7 correspondent aux moments où les ions sont repoussés par les électrodes se trouvant sur les axes du repère cartésien, et attirés par celles se trouvant sur les diagonales du repère. L'amplitude du micro-mouvement des ions, pour cette configuration, est mise en évidence sur la figure 4.8, où sont superposées les positions radiales des ions à différentes phases du champ électrique au cours d'une période rf.

Les courbes de températures associées à cette simulation sont présentées en figure 4.9 en fonction de la fréquence de confinement axial appliquée. Les températures associées aux directions du repère cartésien, T_x et T_y , sont superposées et ne montrent aucun comportement remarquable. Cependant, l'utilisation des températures associées aux directions du mouvement

décomposé dans le système de coordonnées cylindriques, T_r et T_ϕ , montre une importante dissymétrie pour la structure initiale en double anneau. Bien que chacune de ces composantes subisse le forçage radio-fréquence (source du chauffage rf), la température associée aux mouvements radiaux est initialement supérieure à 10 mK, alors que celle associée aux mouvements tangents au cercle est d'environ 2 mK. La température associée au mouvement longitudinal,

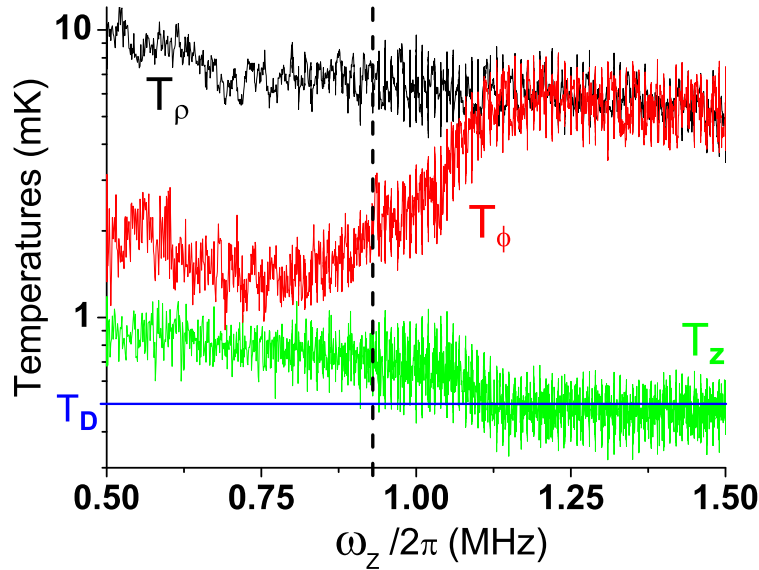


Figure 4.9 – Températures définies dans le système de coordonnées cylindriques (ρ, ϕ, z) : température radiale T_ρ (noir), tangentielle T_ϕ (rouge) et axiale T_z (vert) d'un ensemble de 100 ions, lorsque la fréquence de confinement axial $\propto \omega_z$ est progressivement augmentée de 0,5 MHz à 1,5 MHz en 80 ms. La ligne horizontale bleue matérialise la température limite Doppler et la ligne verticale en tirets noirs marque la fréquence théorique de transition de la structure en double anneau vers la structure en anneau plan pour $\omega_z/2\pi \simeq 0,93$ MHz.

T_z , connaît une faible décroissance à mesure que ω_z augmente. La transition théorique entre la structure en double anneau et celle en unique anneau est attendue pour la fréquence de confinement axial $\omega_z/2\pi \simeq 0,93$ MHz. On constate que la température T_ϕ augmente fortement à l'approche de cette fréquence et rejoint la température radiale T_r . La température T_z subit une diminution plus importante vers 1,1 MHz et devient stationnaire à une valeur moyenne légèrement inférieure à la température Doppler. Ces courbes sont obtenues en effectuant une rampe linéaire sur le potentiel de confinement axial U_{dc} ($\omega_z \propto \sqrt{U_{dc}}$), augmentant la fréquence de confinement axial $\omega_z/2\pi$ de 1 MHz en 80 ms. La simulation a été reproduite avec les mêmes conditions initiales, en effectuant, tous les 10 kHz, des paliers de 10 ms pendant lesquels le potentiel de confinement axial est gardé constant. Les températures évoluent identiquement à celles présentées sur la figure 4.9.

La figure 4.10 montre les positions des centres de masse des deux anneaux en fonction de la fréquence de confinement axial appliquée. Les courbes noires sont obtenues avec le potentiel rf et celles en tirets rouges sont obtenues dans le pseudo-potentiel correspondant, en utilisant un thermostat de température $T = 0,5$ mK. Lorsque le refroidissement laser est appliqué dans le cas du pseudo-potentiel, on constate que les plans contenant les deux anneaux ne sont pas parallèles. Cela est dû à la pression de radiation qui provoque une faible inhomogénéité de la

densité des ions formant les anneaux. L'interaction coulombienne repousse alors les plans des anneaux de façon plus importante à l'endroit où la densité d'ions est plus forte, donnant lieu à un angle entre les deux anneaux. Ce comportement est aussi présent avec le potentiel rf, mais il est cependant beaucoup moins prononcé. Dans les deux cas, rf avec refroidissement laser et pseudo-potential avec thermostat, les positions des centres de masse des deux anneaux se rejoignent pour une valeur de la fréquence de confinement axial très proche de la fréquence attendue (0,93 MHz). Cependant, lorsque les centres de masse des deux anneaux se rejoignent, les ions

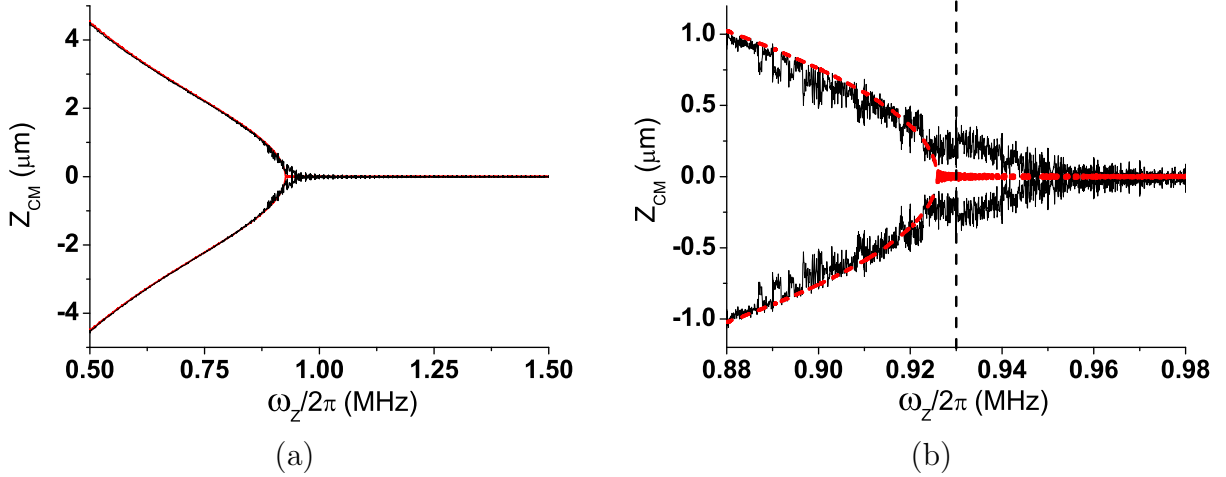


Figure 4.10 – (a) Positions axiales des centres de masse des deux anneaux en fonction de la fréquence de confinement axial $\omega_z/2\pi$. Les deux courbes noires correspondent à celles obtenues lors de la simulation décrite dans le texte. Les courbes en tirets rouges sont obtenues pour les mêmes conditions initiales dans le pseudo-potential correspondant, en utilisant un thermostat de température $T = 0,5$ mK. (b) Zoom sur la zone où les centres de masse des deux anneaux se rejoignent. La ligne verticale en tirets noirs montre la valeur de la fréquence théorique de transition.

ne forment pas encore un anneau plan. En effet, l'obtention de la structure en anneau plan est précédée d'une phase de déformation des deux anneaux, présentée en figure 4.11. L'apparition de cette déformation correspond au début de la phase d'augmentation de la température T_ϕ .

Cette déformation est due au micro-mouvement. En effet, pour les ions situés aux positions inter-électrodes, le micro-mouvement s'effectue dans la direction tangente au cercle, avec une amplitude dépendant de la position angulaire. Ce mouvement forcé tend donc à amener les ions appartenant aux deux anneaux en regard les uns des autres dans le plan transverse, ce qui a pour effet d'augmenter leurs distances axiales relatives. À l'inverse, les ions se trouvant face aux électrodes, pour lesquels le micro-mouvement ne modifie pas la position angulaire mais seulement radiale, restent alignés en quinconce, ce qui permet une distance axiale relative plus faible à énergie potentielle coulombienne égale. Cette déformation n'a pas lieu lorsque la simulation utilise le pseudo-potential. Ainsi, lorsque les centres de masse se rejoignent, la structure est encore fortement déformée. La déviation de la forme en anneau plan est caractérisée en figure 4.12 sur laquelle est présenté l'écart type de la position axiale des ions d'un anneau par rapport à la position du centre de masse. Cette figure est obtenue en réalisant des paliers de 10 ms pendant lesquels le potentiel de confinement axial est gardé constant. Ces paliers sont effectués à partir de 0,8 MHz tout les 10 kHz. La forte décroissance succédant la fréquence $\omega_z/2\pi = 0,93$ MHz, amenant l'écart type à une valeur légèrement inférieure à sa valeur initiale, correspond au retour à la structure en anneau plan. En outre, il est apparent sur les figures 4.11

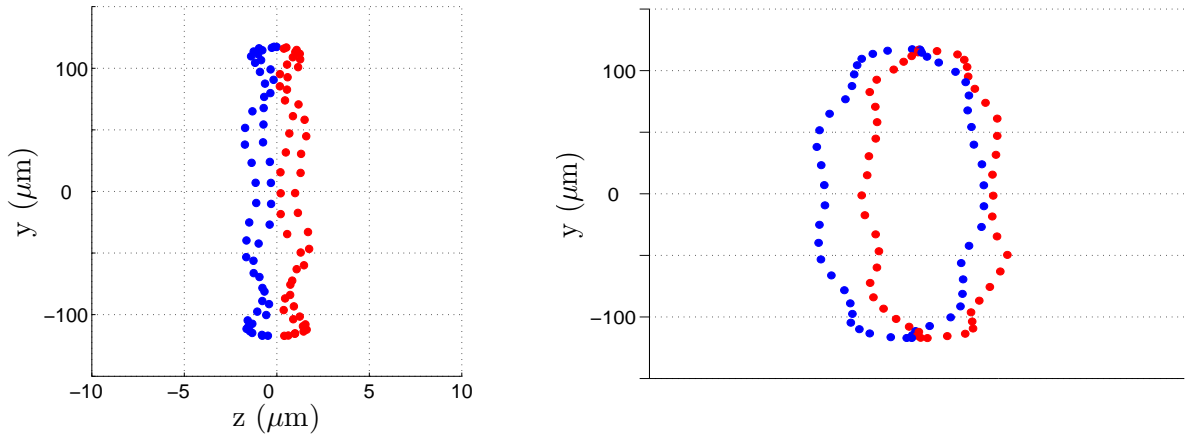


Figure 4.11 – Déformation des deux anneaux d'ions précédant la transition vers la structure en anneau plan. Les deux images montrent le même instant vu sous deux angles de vue différant d'une rotation d'axe y .

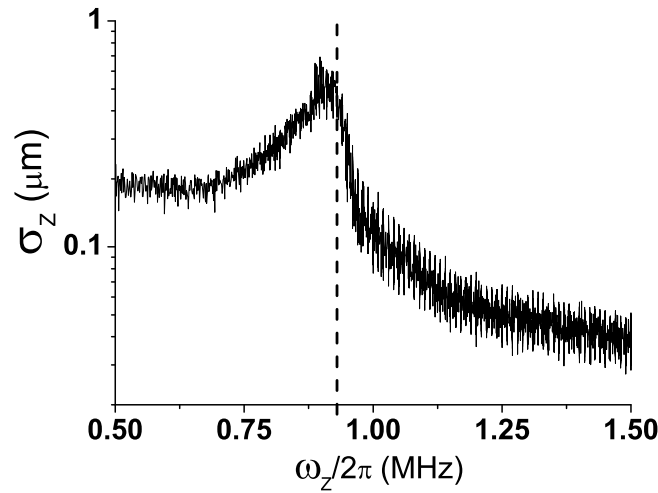


Figure 4.12 – Ecart type de la position axiale des ions d'un anneau par rapport à la position axiale du centre de masse de l'anneau. La ligne verticale en tirets matérialise la transition théorique vers la structure en unique anneau.

que les structures sont plus éloignées en arrière-plan. Cela est dû à l'inhomogénéité de la densité d'ions provoquée par la pression de radiation.

Le micro-mouvement permet aussi d'expliquer l'importante dissymétrie entre les températures radiales et tangentes au cercle, pour le système en double anneau. Les mouvements des ions, lorsqu'ils s'effectuent dans la direction tangente au cercle, sont susceptibles d'amener les ions des deux anneaux différents à se faire face dans le plan transverse. Cela se traduit alors par l'augmentation de la distance inter-ions axiale (Δz). Ces deux directions sont donc couplées, ce qui permet de refroidir les mouvements tangents dans le plan soumis au champ rf, par l'intermédiaire du mouvement longitudinal. Lorsqu'un unique anneau plan est formé, les ions ne peuvent se trouver en regard les uns des autres, et la direction longitudinale est alors découplée des deux direction transverses, permettant le refroidissement de la composante longitudinale jusqu'à la limite Doppler.

Nous avons vu au chapitre 1 que l'amplitude du micro-mouvement est proportionnelle au champ électrique local. Dans le cas de l'octupôle, celui-ci est de la forme $\|\vec{E}\| \propto V_8 r^3$. Lors de la simulation, la position radiale des ions n'a pas changé, mais l'augmentation de V_8 est proportionnelle à celle de ω_z afin de conserver R_{\min} constant (cf. équation (4.20)). Ainsi, bien que l'influence du potentiel rf soit plus prononcée dans le cas de l'anneau plan pour $\omega_z/2\pi = 1,5$ MHz, correspondant à une amplitude de micro-mouvement trois fois supérieure à celle existant dans la configuration initiale, on constate que la température sur l'axe z tombe à la température Doppler, alors que, pour le système en double anneau, T_z ne descend pas en dessous de 1 mK.

Cependant, la dernière décroissance progressive de la température T_z , observée sur la figure 4.9 entre 1 MHz et 1,2 MHz, demeure pour l'instant inexpliquée. Une hypothèse avancée est que la dispersion de la position axiale des ions formant l'anneau, due aux mouvements thermiques, est suffisante pour coupler faiblement la direction z aux directions radiales. Il serait alors possible, par une étude systématique, de déterminer la loi gouvernant "l'épaisseur" limite de l'anneau pour obtenir le découplage de la direction z , en fonction du rayon de l'anneau et du nombre d'ions.

4.3.2 Adiabaticité d'un anneau d'ions en régime de Lamb-Dicke

Dans cette partie, nous déterminons la fréquence de confinement axial $\omega_z/2\pi$ à appliquer pour répondre aux critères d'une horloge. Le choix de cette fréquence est contraint en premier lieu par la possibilité d'atteindre le régime de Lamb-Dicke à la température Doppler T_D du calcium selon l'axe longitudinal du piège (z), axe selon lequel se propage le laser d'horloge.

Lorsque la composante axiale du mouvement des ions peut être décrite par une oscillation harmonique $z(t) = Z \cos(\omega_z t)$, un développement spectral de l'interaction laser-atome dans le régime linéaire [63] permet de décrire le spectre Doppler d'une transition de fréquence f_0 comme la superposition de raies de fréquences $f_0 \pm n\omega_z/2\pi$, dont les intensités sont proportionnelles à $J_n^2(k_L Z)$. Les J_n sont les fonctions de Bessel de première espèce et k_L est le vecteur d'onde du laser sondant la transition d'horloge à 729 nm. Le régime de Lamb-Dicke correspond alors à $k_L Z < 1$, de façon à pouvoir négliger les bandes latérales dues au mouvement de l'atome dans l'onde laser (cf. figure 4.13). L'amplitude du mouvement Z est donnée par $Z = V_z/\omega_z$,

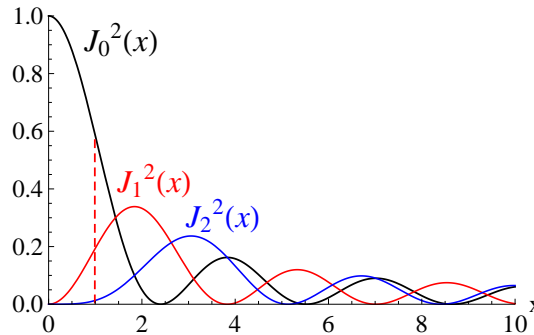


Figure 4.13 – Tracé du carré des trois premières fonctions de Bessel en fonction de l'index de modulation x . Un index de modulation inférieur à l'unité (tirets rouges) permet de considérer uniquement la contribution de J_0 .

où V_z est l'amplitude maximale de la vitesse des ions. Une estimation de V_z à la température Doppler est $V_z = \sqrt{\hbar\Gamma_0/m}$ où $\Gamma_0 = 1,43 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ est le taux d'émission spontanée de la

transition à 397 nm, utilisée pour le refroidissement Doppler. Cela donne à la température Doppler ($T_D = 0,55$ mK) :

$$k_L Z = 2\pi \times 0.63 / \omega_z \text{ (MHz)} \quad (4.32)$$

Pour $\omega_z / 2\pi > 0,63$ MHz, le régime de Lamb-Dicke est atteint et l'effet Doppler du premier ordre ne nuit pas au fonctionnement de l'horloge.

Les fluctuations de la position d'équilibre des ions autour de R_{\min} limitent aussi la précision de l'horloge [96]. Les fluctuations dues au micro-mouvement sont proportionnelles à l'amplitude du micro-mouvement, $\|\vec{\varepsilon}\|$, à la position moyenne R_{\min} (cf. chapitre 1) :

$$\|\vec{\varepsilon}(R_{\min})\| \propto \eta_{ad}(R_{\min}) R_{\min} \quad (4.33)$$

Le rayon minimisant le pseudo-potentiel R_{\min} ayant une valeur minimale imposée par R_{crit} , nous devons minimiser le paramètre d'adiabaticité η_{ad} pour limiter la fluctuation en position due au micro-mouvement. Nous avons vu que $\eta_{ad}(r) < 0,36$ (cf. chapitre 1) à la position d'équilibre des ions, permet de garantir leur stabilité dans le piège. Or, à la position d'équilibre des ions $r = R_{\min}$, le paramètre d'adiabaticité prend une forme particulièrement simple :

$$\eta_{ad}(R_{\min}) = 2 \sqrt{k-1} \omega_z / \Omega \quad (4.34)$$

qui ne dépend pas explicitement de R_{\min} . La fréquence de fonctionnement du piège rf possède une limite technologique. Nous admettrons qu'une fréquence de $\Omega/2\pi = 20$ MHz constitue une valeur typique haute à ne pas dépasser. La limite inférieure sur ω_z imposée par l'obtention du régime de Lamb-Dicke à la température Doppler, fixe une valeur minimale au paramètre d'adiabaticité en R_{\min} . Pour le potentiel rf d'un octupôle linéaire fonctionnant à la fréquence 20 MHz, nous obtenons : $\eta_{ad}(R_{\min}) > 0,11$.

Plusieurs simulations ont été réalisées afin d'évaluer l'influence du micro-mouvement sur la dynamique. Nous avons pu noter qu'il est de plus en plus difficile de refroidir les ions à mesure que la valeur du paramètre d'adiabaticité augmente. Un résultat significatif a été obtenu en refroidissant un ensemble de 100 ions dans un potentiel rf tel que $\Omega/2\pi = 20$ MHz, $\omega_z/2\pi = 1$ MHz et $\eta_{ad}(R_{\min}) \simeq 0,17$. Dans ces conditions, le rayon critique prend la valeur $R_{\text{crit}} = 114 \mu\text{m}$. Le potentiel rf V_8 est tel que les ions froids se disposent en un unique anneau de rayon $R_{\min} = 139 \mu\text{m}$. Celui-ci est montré en figure 4.14a. Les ions sont refroidis par laser Doppler selon les trois directions de l'espace et le refroidissement est maintenu pendant l'intégralité de la simulation. La température atteinte selon l'axe de symétrie du piège est la température limite Doppler ($T_D = 0,55$ mK), et la température dans le plan transverse est d'environ 6 mK. Une fois les ions froids et dans un état où la température est stationnaire, le potentiel de confinement axial est augmenté de façon identique à ce qui a été fait précédemment, jusqu'à $\omega_z/2\pi = 2$ MHz. Dans le même temps, comme nous l'avons fait dans la section précédente, le potentiel rf V_8 est augmenté de façon à conserver le rayon R_{\min} constant. Aucune augmentation significative de la température n'est observée, même dans le plan radial où le mouvement subit le forçage radio-fréquence. Cependant, l'anneau d'ions se scinde progressivement en huit sous-structures rapportées sur la figure 4.14b, qui correspond à la valeur $\omega_z/2\pi = 2$ MHz. Le paramètre d'adiabaticité est alors très proche de la valeur critique ($\approx 0,36$). Les positions adoptées par les sous-ensembles d'ions correspondent aux directions inter-électrodes.

L'approche du pseudo-potentiel, qui décrit le confinement par un potentiel radial isotrope, ne suffit pas pour décrire cette structure. Un comportement analogue est observable lors des simulations, même dans le cas d'une faible valeur du paramètre d'adiabaticité η_{ad} , lorsque l'anneau plan est uniquement constitué de huit ions. Dans ce cas, chaque ion se place isolément

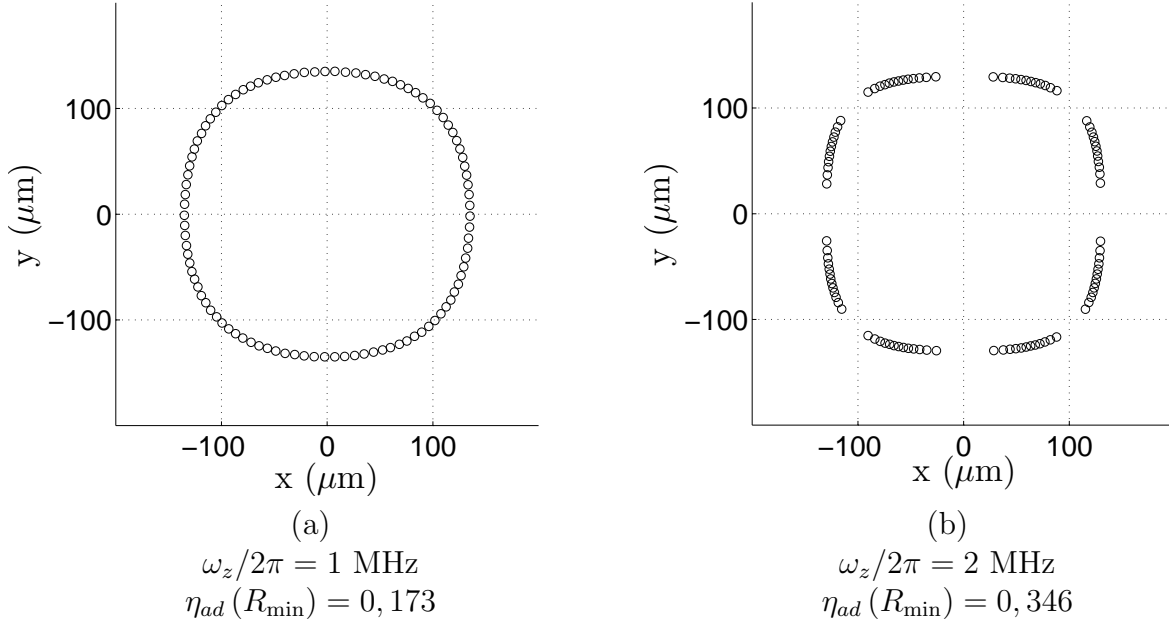


Figure 4.14 – Vue dans le plan radial de structures composées de 100 ions, obtenues dans le potentiel radio-fréquence d'un octupôle linéaire.

dans une direction inter-électrodes. Une explication avancée à ce comportement relève des propriétés de symétrie du champ rf. En effet, lorsque les ions sont situés face aux électrodes, le champ, et par suite l'amplitude du micro-mouvement, est uniquement radial. Ainsi, au cours du temps, la position de la particule oscille dans le potentiel radial local $\propto \omega_{\text{loc}}^2$ (cf. chapitre 1) avec l'amplitude du micro-mouvement $\|\vec{\varepsilon}'(R_{\min})\|$. Définissant l'origine du potentiel à la position R_{\min} , l'énergie potentielle moyenne sur une période rf, U_{moy} , est donnée par :

$$U_{\text{moy}} = \frac{1}{2} m \omega_{\text{loc}}^2 \overline{(\|\vec{\varepsilon}'(R_{\min})\| \cos(\Omega t))^2} = \frac{1}{4} m \omega_{\text{loc}}^2 \|\vec{\varepsilon}'(R_{\min})\|^2 \quad (4.35)$$

Au contraire, le champ local aux positions inter-électrodes est tangent au cercle minimisant le pseudo-potentiel. Ainsi, le micro-mouvement s'effectue, en première approximation, selon les équipotentielles, impliquant que le potentiel moyen sur une période rf est nul. Cependant, cette explication demeure une hypothèse et demande à être vérifiée.

Ainsi, dans les applications où il est nécessaire de conserver une structure symétrique pour laquelle chaque ion connaît la même valeur du potentiel (y compris le potentiel coulombien), pour la prise en compte de l'effet Stark, la structure obtenue en figure 4.14 ne peut convenir. Nous devons donc restreindre la valeur du paramètre d'adiabaticité $\eta_{ad}(R_{\min})$ à une valeur bien inférieure à la limite d'adiabaticité ($\approx 0,36$).

La fréquence de confinement axial $\omega_z/2\pi$ réalisant un compromis entre l'obtention du régime de Lamb-Dicke dans la direction axiale, et induisant une faible valeur du paramètre d'adiabaticité permettant l'obtention d'une structure symétrique dans le plan radial, est choisie à $\omega_z/2\pi = 1 \text{ MHz}$, ce qui correspond à un paramètre d'adiabaticité $\eta_{ad}(R_{\text{crit}}) = 0,173$ pour $\omega/2\pi = 20 \text{ MHz}$.

Une fois la fréquence $\omega_z/2\pi$ fixée, le rayon critique permettant l'obtention d'un anneau plan ne dépend que du nombre d'ions. Nous montrons en figure 4.15 un continuum de configurations

possibles pour des ensembles de 10 et 100 ions, en fonction du potentiel radio-fréquence V_8 . Ces configurations sont calculées pour $\Omega/2\pi = 20$ MHz, $\omega_z/2\pi = 1$ MHz et $r_0 = 1$ mm.

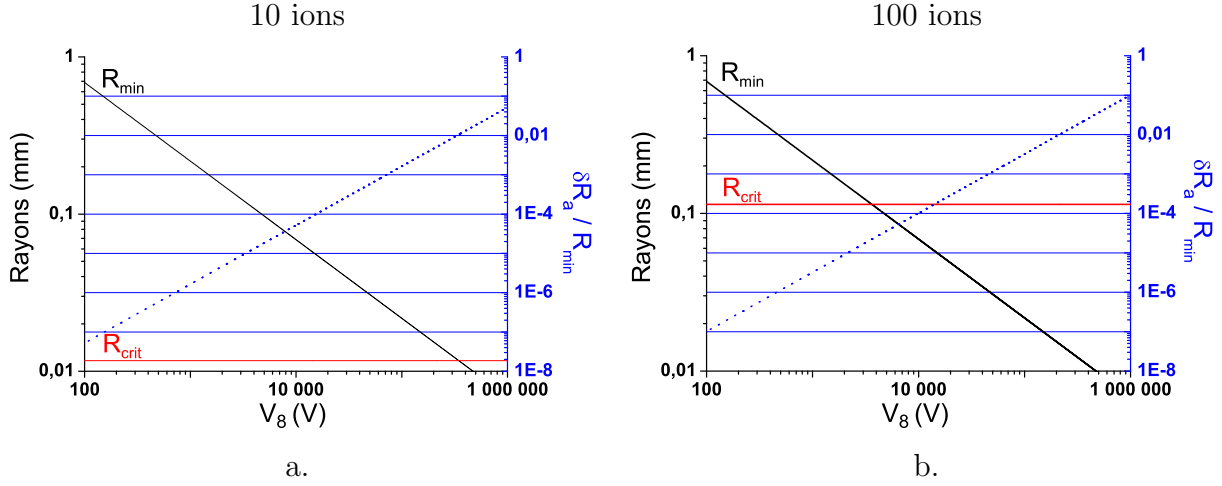


Figure 4.15 – Rayons R_{\min} (ligne noire, axe de gauche), R_{crit} (ligne rouge, axe de gauche) et variation relative du rayon d'équilibre de l'anneau en cas de perte d'un ion (ligne pointillé bleu, axe de droite), calculés pour $\omega_z = 1$ MHz et $r_0 = 1$ mm, en fonction du potentiel V_8 appliqué sur (a) un anneau de 10 ions et (b) un anneau de 100 ions.

On constate qu'augmenter d'un facteur 10 le nombre d'ions se traduit par une augmentation proportionnelle du rayon critique. De ce fait, les effets systématiques dus au micro-mouvement, qui à η_{ad} fixé sont proportionnels au rayon, ($\|\vec{\varepsilon}(R_{\min})\| \propto \eta_{ad}(R_{\min}) R_{\min}$), ne peuvent être limités qu'en choisissant de faibles nombres d'ions. Les calculs effectués par C. Champenois indiquent que pour cette valeur du paramètre d'adiabaticité, une amplitude de micro-mouvement acceptable pour une application à la métrologie requiert un anneau de rayon inférieur à $100 \mu\text{m}$. La contrainte sur l'obtention de l'anneau plan $R_{\min} > R_{\text{crit}}$, où R_{crit} est proportionnel au nombre d'ions, impose alors un nombre d'ions maximal. Le nombre d'ions doit être limité à quelques dizaines tout au plus. La configuration à 10 ions nécessite des potentiels beaucoup plus élevés pour amener R_{\min} au rayon critique. Cependant, les valeurs de V_8 peuvent être abaissées en diminuant le rayon intérieur du piège r_0 , selon une loi d'échelle en V_{2k}/r_0^k . On constate aussi que lorsque $R_{\min} = R_{\text{crit}}$, la variation relative du rayon d'équilibre des ions, en cas de perte d'un ion lors du fonctionnement de l'horloge, est un peu plus importante pour les faibles nombres d'ions. La configuration à 10 ions permet une variation relative de l'ordre du pour cent. Les calculs effectués par C. Champenois montrent que cette variation relative est, pour ce faible nombre d'ions, déjà compatible avec les applications métrologiques [96].

4.3.3 Un anneau d'ions sans refroidissement laser

Lors de la recherche des configurations acceptables, permettant d'envisager l'anneau d'ions comme support d'un étalon de fréquence, nous avons jusqu'à présent refroidi la structure ionique de façon continue, par refroidissement Doppler, selon les trois directions de l'espace. Cependant, lors de l'interrogation des ions par le laser d'horloge, il est impératif que le laser de refroidissement soit arrêté, de façon à supprimer les perturbations que ce dernier produit sur la transition d'horloge. Nous devons donc nous assurer de la stabilité thermique des structures en

anneau lorsque le laser de refroidissement est éteint, au moins sur des durées suffisantes pour effectuer l'interrogation des ions.

Nous avons déterminé dans la section précédente qu'un choix convenable de fréquence de confinement axial, $\omega_z = 1$ MHz, fixe la valeur minimale du paramètre d'adiabaticité évalué à la position des ions à $\eta_{ad}(R_{\min}) = 0,173$. Ainsi, l'amplitude du micro-mouvement responsable du chauffage rf est directement proportionnelle au rayon de l'anneau, $\|\vec{\varepsilon}(R_{\min})\| \propto \eta_{ad}(R_{\min}) R_{\min}$. Cela semble militer pour qu'à nombre d'ions donné, le rayon d'équilibre de l'anneau (confondu avec le rayon minimisant le pseudo-potentiel) R_{\min} , soit le plus proche possible de R_{crit} , valeur minimale permettant l'obtention d'un anneau plan, de façon à limiter le chauffage rf.

Afin de vérifier ce comportement, nous effectuons une série de simulations pour des ensembles de 20 et 40 ions, dont les courbes de températures sont présentées en figure 4.16. Dans ces simulations, les ions soumis à un potentiel de confinement axial $\omega_z/2\pi = 1$ MHz et un potentiel radial de fréquence rf 20 MHz. Le potentiel V_8 est choisi tel que la structure d'ions attendue à basse température dans chaque simulation soit une structure en unique anneau plan. Plusieurs simulations sont effectuées pour différentes valeurs du rapport du rayon de l'anneau sur le rayon critique : $R_{\min}/R_{\text{crit}} = \{1,7; 1,5; 1,3; 1,1\}$, obtenues en choisissant la valeur du potentiel V_8 en conséquence.

La température initiale de l'ensemble d'ions est d'environ 100 mK selon chaque direction de l'espace. A cette température, aucune structure n'est formée. Les ions soumis au refroidissement Doppler selon chaque direction de l'espace refroidissent, et forment une structure en anneau pour toutes les simulations effectuées. A $t = 10$ ms, le refroidissement Doppler est arrêté, et la simulation se poursuit pendant une durée de 40 ms au cours de laquelle les ions ne sont soumis qu'au potentiel de confinement et à l'interaction coulombienne.

Les ensembles de 20 ions ne montrent aucun signe de réchauffement sur la durée de la simulation après l'arrêt des lasers. Pour ce nombre d'ions, plusieurs simulations effectuées pour la même valeur du rapport R_{\min}/R_{crit} montrent que la valeur de la température T_z , stationnaire à partir de l'arrêt des lasers, fluctue autour de la limite Doppler d'une simulation à l'autre. Les différentes valeurs stationnaires obtenues sont incluses dans la distribution de températures mesurée avant l'arrêt des lasers.

En revanche, les simulations effectuées avec 40 ions montrent des comportements très différents en fonction du rapport R_{\min}/R_{crit} . Pour les cas $R_{\min}/R_{\text{crit}} = 1,7$ et $1,5$, aucun chauffage n'est apparent sur la durée de la simulation, bien que pour le cas à $1,5$ une variation de la courbe de température T_z soit visible mais non significative. Pour les deux valeurs les plus faibles du rapport R_{\min}/R_{crit} , le comportement de la courbe T_z au moment de l'arrêt des lasers montre un rapide réchauffement de la composante axiale du mouvement des ions, d'autant plus rapide que le rayon de l'anneau est proche du rayon critique. La dernière simulation indique que la température Doppler n'est pas atteinte dans la direction longitudinale, même lorsque le refroidissement Doppler est actif. L'analyse du mouvement des ions révèle que la structure ne comporte pas deux anneaux distincts, mais bien un unique anneau, dont la dispersion des ions le long de l'axe z est plus prononcée que pour les autres structures d'un facteur 2 environ.

Ces simulations témoignent de nouveau du découplage de la direction axiale du mouvement des ions, des deux directions transverses. Elles mettent de plus en évidence que, pour de faibles nombres d'ions, ce découplage est robuste à l'arrêt du refroidissement laser. Lorsque le nombre d'ions composant la structure augmente, le rapport R_{\min}/R_{crit} semble jouer un rôle dans la stabilité du découplage, face à la dynamique forcée induite par le champ rf.

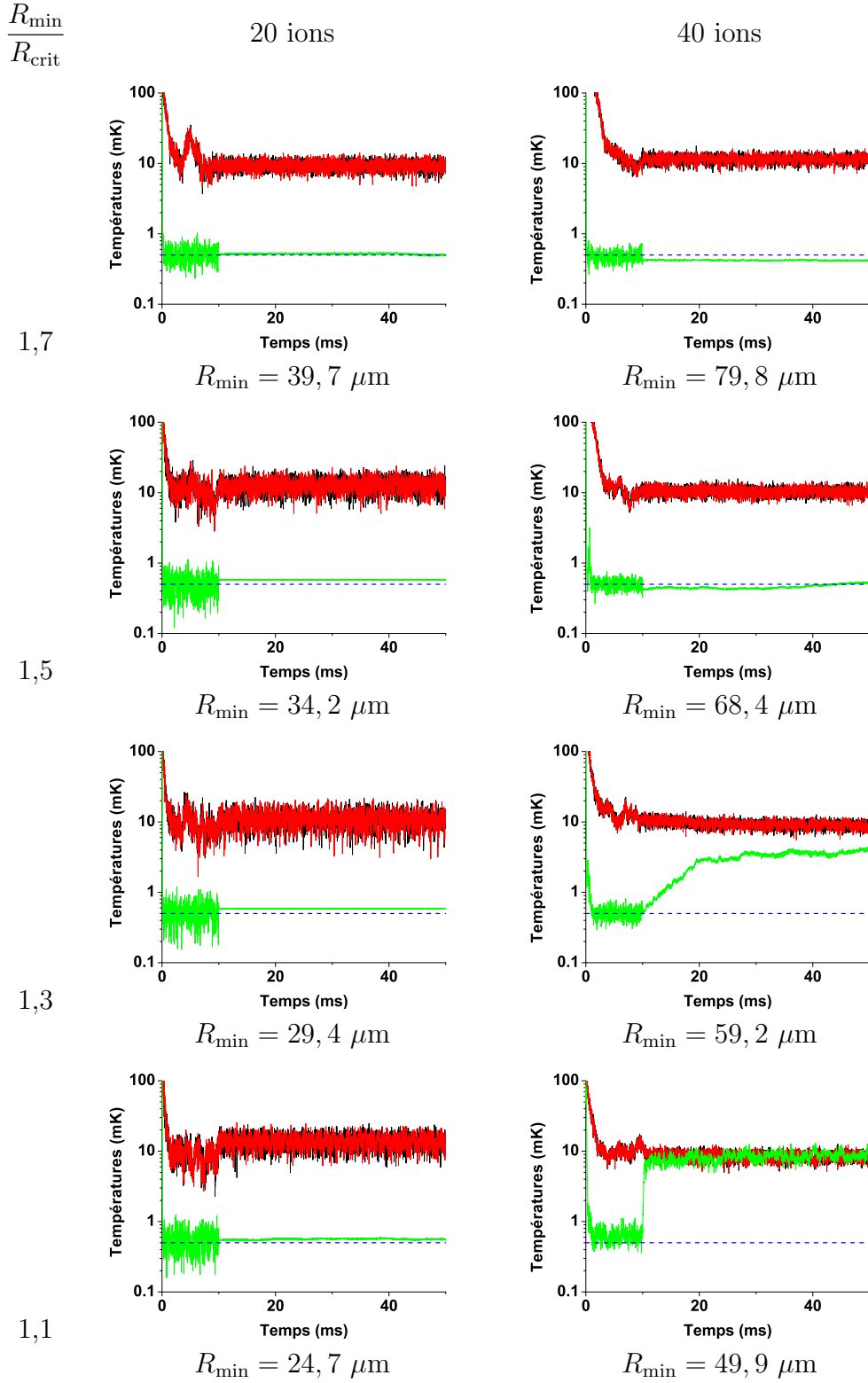


Figure 4.16 – Températures des ensembles de 20 et 40 ions formant des structures en anneau plan, pour différentes valeurs du potentiel rf V_8 . Les lasers de refroidissement Doppler, initialement appliqués selon chaque direction de l'espace, sont arrêtés à $t = 10$ ms.

4.4 Conclusions

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés aux propriétés des structures d'ions en anneau plan, obtenues à basses températures dans le potentiel idéal des multipôles linéaires d'ordres supérieurs. Une étude analytique nous a tout d'abord permis d'obtenir une condition théorique nécessaire à l'obtention d'une telle structure. Celle-ci, lorsque le potentiel de confinement est fixé, est donnée par l'existence d'une valeur minimale du rayon de l'anneau, R_{crit} , en dessous de laquelle la structure en anneau plan n'est pas la structure minimisant l'énergie potentielle.

Nous nous sommes ensuite intéressés aux caractéristiques dynamiques de cette structure, et avons montré qu'elle possède une propriété de découplage de la composante longitudinale du mouvement des ions, des deux composantes transverses. Cela offre la possibilité de refroidir cette composante axiale jusqu'à la température limite Doppler. Nous avons ensuite mis en évidence que l'approche du pseudo-potentiel est inapte à décrire les structures d'ions obtenues lorsque le paramètre d'adiabaticité prend des valeurs s'approchant de la limite empirique.

Finalement, nous avons testé la stabilité thermique d'une telle structure lorsque le refroidissement laser est interrompu. Les simulations effectuées ne montrent aucun réchauffement de la structure pour les systèmes à faible nombre d'ions. Cependant, ce comportement semble dépendre de façon non triviale du nombre d'ions ainsi que des conditions de confinement, notamment du rapport $R_{\text{min}}/R_{\text{crit}}$, et laisse ouverte la question de l'existence d'une loi d'échelle en fonction du nombre d'ions permettant d'assurer la stabilité thermique à l'arrêt des lasers de refroidissement.

Chapitre 5

Des lignes d'ions en multipôles linéaires

5.1 Introduction

Pour un grand nombre d'applications, en particulier pour les étalons de fréquence [97], les protocoles d'information quantique [98] et les simulations quantiques [22], il peut être souhaitable de disposer de plusieurs sites à l'intérieur du piège où le champ radio-fréquence s'annule. Par rapport au piège rf originel, le piège de Paul, dans lequel le champ rf s'annule en un unique point au centre du piège, les pièges quadrupolaires linéaires constituent déjà une voie dans ce sens en étendant la zone de champ rf nul à l'axe de révolution du piège. Dans les pièges multipolaires d'ordres supérieurs, la zone où le champ rf reste relativement faible est beaucoup plus étendue que dans leurs homologues quadrupolaires [33], ce qui permet d'accéder à des nombres d'ions piégés beaucoup plus importants pour lesquels le micro-mouvement reste négligeable [99].

Cependant, les sites de champs rf strictement nuls sont identiques à ceux des quadrupôles. De plus, en géométrie linéaire, le confinement axial est réalisé par un champ statique qui possède une composante déconfinante dans le plan radial. Hormis pour le quadrupôle, l'axe de révolution des pièges multipolaires constitue alors un ensemble de positions d'équilibres instables pour les ions. Dans ces pièges, des minimums locaux peuvent être obtenus par l'emploi de potentiels statiques superposés aux potentiels rf [17, 96]. Les ions confinés en ces positions d'équilibre subissent alors un mouvement forcé.

La superposition d'un potentiel rf d'ordre différent au potentiel rf du piège, permet de générer des minimums locaux du pseudo-potentiel où le champ rf s'annule. Dans une telle configuration, les ions froids peuvent demeurer en ces positions de façon individuelle ou organisés en lignes parallèles à l'axe du piège. En l'absence d'excitation paramétrique, le refroidissement Doppler permet alors d'atteindre la température limite Doppler.

Dans ce chapitre, nous donnons tout d'abord un exemple de principe en l'appliquant au cas de l'octupôle linéaire, auquel un potentiel quadrupolaire est superposé. Cet exemple est illustré par des résultats de simulations de dynamique moléculaire. Nous présentons ensuite le développement des calculs dans le cas général. Dans une troisième partie, nous prenons en compte le fait que le champ additionnel est généré par des électrodes dont la géométrie n'est pas adaptée [100]. Nous montrons les conséquences que cela entraîne pour le cas particulier que nous avons développé.

5.2 Un exemple de principe

Nous décrivons ici le principe de création de minimums de potentiel supplémentaires pour lesquels le champ rf s'annule dans le cas du piège octupolaire linéaire. Dans le but de créer des noeuds supplémentaires dans le champ rf, un potentiel quadrupolaire, $\Phi_{4\text{rf}}$, est superposé à celui de l'octupôle, $\Phi_{8\text{rf}}$, ces deux potentiels possédant même fréquence et même phase. Grâce au théorème de superposition, nous savons que le potentiel résultant dans le plan radial, Φ_{rf} , est :

$$\Phi_{\text{rf}} = \Phi_{8\text{rf}} + \Phi_{4\text{rf}}, \quad (5.1)$$

où l'expression des potentiels électriques $2k$ -polaires, $2k$ étant le nombre d'électrodes, exprimés en coordonnées polaires (voir figure 5.1), peut être approximée par [33] :

$$\Phi_{(2k)\text{rf}}(\mathcal{R}, \phi, t) = -V_{2k}\mathcal{R}^k \cos(k\phi) \cos(\Omega t) \quad (5.2)$$

avec Ω et V_{2k} respectivement la fréquence et l'amplitude des potentiels rf appliqués, et $\mathcal{R} = r/r_0$ la distance radiale au centre du piège rapportée au rayon intérieur du piège, r_0 . Les composantes du champ électrique $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi_{\text{rf}}$ sont données par :

$$E_r = +\frac{2}{r_0} [2V_8\mathcal{R}^3 \cos(4\phi) + V_4\mathcal{R} \cos(2\phi)] \cos(\Omega t), \quad (5.3)$$

$$E_\phi = -\frac{2}{r_0} [2V_8\mathcal{R}^3 \sin(4\phi) + V_4\mathcal{R} \sin(2\phi)] \cos(\Omega t). \quad (5.4)$$

Avec notre choix de phase initiale (représentée en figure 5.1) et de système de coordonnées, il découle de façon immédiate de l'équation (5.4) que E_ϕ peut être annulée dans chaque direction ϕ_n telle que $\phi_n = n\pi/2$, avec $n \in \mathbb{Z}$. La variation relative des cosinus dans l'équation (5.3)

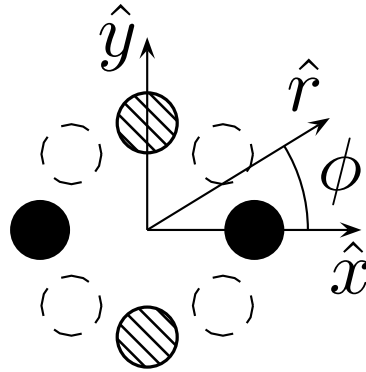


Figure 5.1 – Branchement d'un potentiel électrique rf sur les électrodes d'un piège octupolaire linéaire. Les barreaux pleins et hachurés montrent respectivement les polarités $-V_4$ et $+V_4$ du potentiel quadrupolaire appliqué à l'instant $t = 0$ s. Les électrodes représentées en lignes brisées sont uniquement connectées au potentiel octupolaire.

permet alors une annulation totale du champ rf aux positions radiales relatives \mathcal{R}_{of} pour $\phi_{\pm 1} = \pm\pi/2$ (l'axe y dans le cas présent). Cette position radiale relative dépend du rapport des deux potentiels appliqués par :

$$\mathcal{R}_{\text{of}}^2 = V_4 / (2V_8). \quad (5.5)$$

Dans l'approximation adiabatique, la dynamique d'un ion de charge q_e et de masse m à l'intérieur du piège peut être comprise en utilisant le pseudo-potentiel (psp) Ψ , qui résulte de la moyenne temporelle du champ électrique radio-fréquence $\Psi = q_e^2 \|\vec{E}\|^2 / 2m\Omega^2$ (cf. sections 1.2 et 1.3). Le psp n'obéit pas au théorème de superposition et dans notre cas le psp résultant s'écrit :

$$\Psi(\mathcal{R}, \phi) = \Psi_8(\mathcal{R}) + \Psi_4(\mathcal{R}) + 2\sqrt{\Psi_8(\mathcal{R})\Psi_4(\mathcal{R})} \cos(2\phi) \quad (5.6)$$

où $\Psi_{2k}(\mathcal{R})$ sont les psp $2k$ -polaires habituels :

$$\Psi_{2k}(\mathcal{R}) = \frac{k^2}{4} \frac{q_e^2 V_{2k}^2}{m r_0^2 \Omega^2} \mathcal{R}^{2k-2} = \psi_{2k} \mathcal{R}^{2k-2}. \quad (5.7)$$

En plus du noeud central pré-existant, l'équation (5.6) montre que deux minimums supplémentaires existent pour $\mathcal{R} \neq 0$ si $\cos(2\phi) = -1$ (pour $\phi = \phi_{\pm 1}$). Par définition, les minimums du pseudo-potentiel se trouvent aux noeuds du champ rf, dont les positions sont données par l'équation (5.5). Utilisant le fait que $\mathcal{R}_{0f}^4 = \psi_4/\psi_8$, nous écrivons l'équation (5.6) dans le cas où $\cos(2\phi) = -1$:

$$\Psi(\mathcal{R}, \phi_{\pm 1}) = \psi_8 \mathcal{R}^6 + \psi_4 \mathcal{R}^2 - 2\sqrt{\psi_8 \psi_4} \mathcal{R}^4 \quad (5.8)$$

$$= \psi_8 (\mathcal{R}^6 + \mathcal{R}_{0f}^4 \mathcal{R}^2 - 2\mathcal{R}_{0f}^2 \mathcal{R}^4) \quad (5.9)$$

La figure 5.2 montre le pseudo-potentiel normalisé $U_r = \Psi(\mathcal{R}, \phi_{\pm 1})/\psi_8$ pour trois différentes valeurs de \mathcal{R}_{0f} . On constate que la raideur du minimum central est elle aussi affectée par le potentiel quadrupolaire. Une représentation tri-dimensionnelle du psp est tracée en figure 5.3 pour la valeur particulière $\mathcal{R}_{0f} = 0,2$. Celle-ci met en évidence l'aspect fortement anisotrope du potentiel de confinement radial. Cependant, le potentiel de piégeage total U_{trp} résulte de la

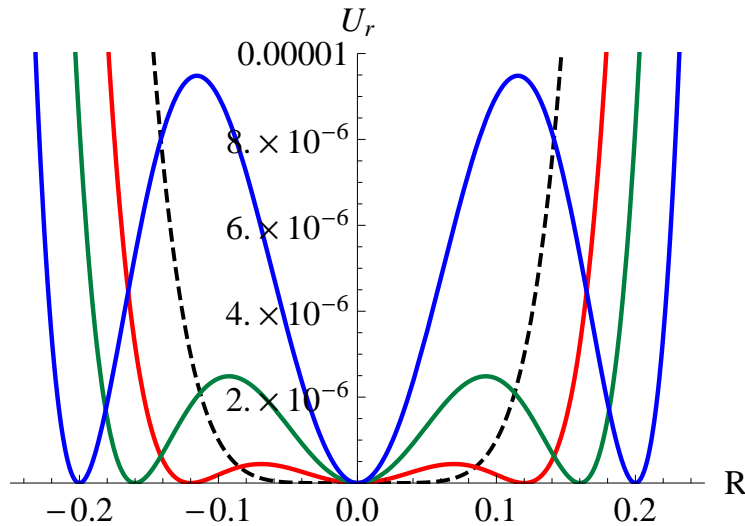


Figure 5.2 – Pseudo-potentiel normalisé $U_r = \Psi/\psi_8$ dans la direction $\phi_{\pm 1}$ pour trois valeurs de \mathcal{R}_{0f} . Les courbes de couleur rouge, verte et bleue correspondent respectivement à $\mathcal{R}_{0f} = 0,12$; $0,16$ et $0,2$. La courbe en pointillés noirs représente le psp normalisé de l'octupôle seul (\mathcal{R}^6).

somme du psp, permettant le confinement radial des ions, et du potentiel statique réalisant le confinement axial (selon z), qui peut être approximé par un potentiel harmonique $m\omega_z^2 z^2/2$. Ce potentiel statique obéit à l'équation de Laplace et possède donc une contre-partie déconfinante

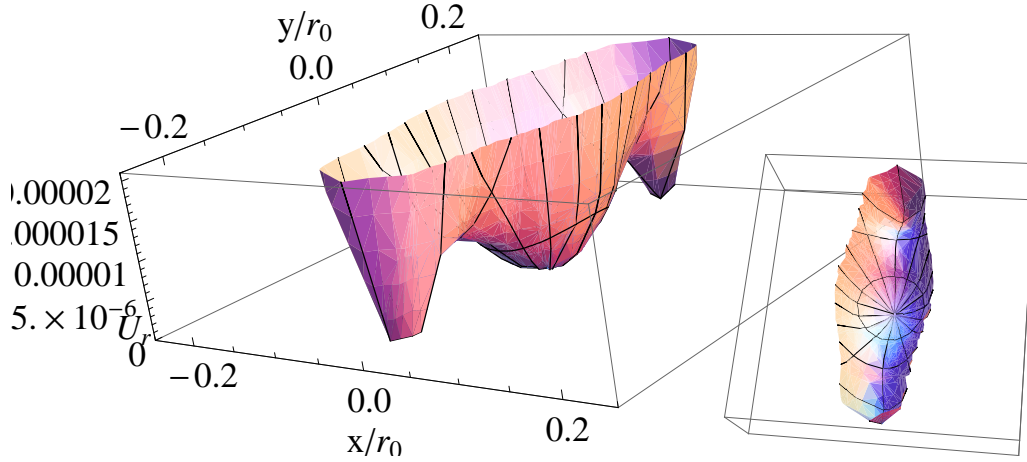


Figure 5.3 – Représentation du psp normalisé dans le plan radial, pour $\mathcal{R}_{of} = 0,2$, suivant deux points de vue différents.

dans le plan radial $-m\omega_z^2 r^2/4$ [37, 96]. Si un potentiel statique de symétrie octupolaire V_{st} est superposé sur les électrodes rf, le potentiel effectif total s'écrit :

$$U_{trp} = \Psi + q_e V_{st} \mathcal{R}^4 \cos(4\phi) + \frac{1}{2} m \omega_z^2 \left(z^2 - \frac{\mathcal{R}^2}{2} r_0^2 \right). \quad (5.10)$$

Pour assurer la correspondance entre les minimums du potentiel total U_{trp} et les positions de champ rf nul, il est indispensable de compenser la partie déconfinante dans le plan radial par un choix approprié du potentiel octupolaire statique V_{st} . La compensation des forces dérivant de ces potentiels aux positions de champs rf nuls s'obtient sous la condition :

$$q_e V_{st} = m \omega_z^2 r_0^2 / 8 \mathcal{R}_{of}^2. \quad (5.11)$$

Pour rester aussi général que possible, nous avons considéré un potentiel statique octupolaire pour compenser l'effet déconfinant du confinement axial. L'utilisation d'un potentiel quadrupolaire conduit à une condition similaire qui a l'avantage de ne pas dépendre de \mathcal{R}_{of} . Nous verrons cependant, dans la suite, qu'en pratique il peut être préférable d'opter pour l'utilisation du potentiel octupolaire si des positions relatives $\mathcal{R}_{of} > 0,2$ sont requises.

Remarquons que la position de champ rf nul, \mathcal{R}_{of} , ainsi que la condition de l'équation (5.11) sont indépendantes de la charge et de la masse des particules confinées (car $\omega_z^2 \propto 1/m$). Ce qui est décrit ici s'applique donc à des systèmes multi-espèces.

L'ordre le plus bas du développement en série du potentiel de piégeage effectif U_{trp} , autour de ses minimums $(\mathcal{R}_{of}, \phi_{\pm 1})$, lorsque l'équation (5.11) est satisfaite, permet de définir les fréquences caractéristiques du mouvement dans les directions radiales et angulaires :

$$\omega_r^2 = \omega_z^2 \left[\frac{8\psi_4}{m r_0^2 \omega_z^2} + 1 \right] = 4\omega_u^2 + \omega_z^2, \quad (5.12)$$

$$\omega_\phi^2 = \omega_z^2 \left[\frac{8\psi_4}{m r_0^2 \omega_z^2} - 2 \right] = 4\omega_u^2 - 2\omega_z^2, \quad (5.13)$$

où ω_u est la fréquence caractéristique du mouvement dans le plan radial, si uniquement le potentiel quadrupolaire était appliqué. Les raideurs locales du potentiel, données dans les équations (5.12) et (5.13), sont contrôlées par l'amplitude du potentiel quadrupolaire V_4 et

le confinement axial ω_z . Il est ainsi possible de contrôler la morphologie d'un ensemble d'ions froids se trouvant au fond du puits de potentiel harmonique anisotrope $(\omega_r, \omega_\phi, \omega_z)$ [11, 101, 102]. L'équation (5.13) montre qu'il est nécessaire de respecter la contrainte $q_e V_4 > m r_0^2 \omega_z \Omega / 2$ pour réaliser le confinement dans la direction angulaire.

Le potentiel local aux positions d'équilibre étant indépendant du potentiel octupolaire V_8 , ce dernier peut être utilisé pour contrôler la distance relative entre les deux minimums. En effet, nous pouvons exprimer le psp total en fonction de ψ_4 et \mathcal{R}_{of} , tel que :

$$\Psi(\mathcal{R}, \phi_{\pm 1}) = \psi_4 \mathcal{R}^2 \left(1 + \left(\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{R}_{\text{of}}} \right)^4 - 2 \left(\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{R}_{\text{of}}} \right)^2 \right) \quad (5.14)$$

La figure 5.4 représente le psp normalisé $U_\omega = \Psi(\mathcal{R}, \phi_{\pm 1}) / \psi_4$ pour différentes valeurs de \mathcal{R}_{of} . Cette représentation du potentiel est équivalente à faire varier \mathcal{R}_{of} (et V_{st} en conséquence) en conservant le potentiel V_4 à une valeur constante, *i.e.* à déplacer les ensembles d'ions en conservant $(\omega_r, \omega_\phi, \omega_z)$ constant.

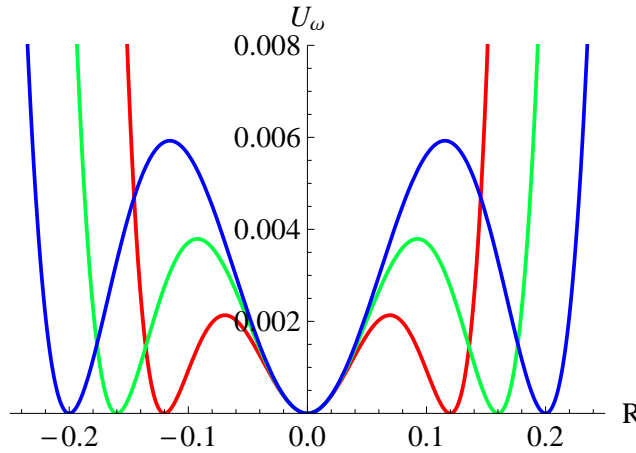


Figure 5.4 – Pseudo-potential normalisé $U_\omega = \Psi / \psi_4$ dans la direction $\phi_{\pm 1}$ pour trois valeurs de \mathcal{R}_{of} . Les courbes de couleur rouge, verte et bleue correspondent respectivement à $\mathcal{R}_{\text{of}} = 0,12$; $0,16$ et $0,2$.

Dans un second temps, nous montrons que les ions peuvent être refroidis jusqu'à la limite Doppler, et confinés dans les deux minimums supplémentaires de façon contrôlée. Nous réalisons dans ce but une simulation de dynamique moléculaire d'un ensemble de 10 ions calcium, soumis au refroidissement Doppler, dans le potentiel radio-fréquence idéal d'un octupôle linéaire de rayon intérieur $r_0 = 0,2$ mm.

Les ions sont tout d'abord refroidis par refroidissement Doppler selon les trois directions de l'espace, dans le potentiel octupolaire seul (V_4 et V_{st} sont nuls à $t = 0$), et forment alors un anneau d'ions (cf. chapitre 4), visible sur la figure 5.5a. L'amplitude du potentiel rf octupolaire V_8 (~ 197 V) est telle que l'anneau possède un rayon d'environ $20 \mu\text{m}$ dans le plan $z = 0$, pour un confinement axial $\omega_z = 2\pi \times 1$ MHz. La température de cette structure est de l'ordre de 10mK dans le plan radial et atteint la limite Doppler selon l'axe du piège.

A $t = 2$ ms, le potentiel rf V_4 est appliqué, produisant la séparation de l'anneau en deux ensembles de cinq ions, visibles sur la figure 5.5b. De $t = 2$ ms à $t = 4,4$ ms, l'amplitude V_4 est augmentée de façon linéaire, augmentant la séparation des deux ensembles d'ions ainsi

que la raideur locale des deux minimums (voir la figure 5.2), jusqu'à ce que chaque sous-ensemble d'ions se situe à une distance de $0,22r_0$ du centre du piège. Les ions forment alors deux chaînes parallèles à l'axe du piège, visibles sur les figures 5.5c et 5.5d. A cet instant, V_4 est gardé constant et V_{st} est allumé et augmenté jusqu'à la valeur satisfaisant l'équation (5.11) (1,7 V) en 1 ms, permettant la correspondance des positions d'équilibre des chaînes avec les positions de champs rf nuls. Les fréquences caractéristiques du confinement local valent alors $\omega_r = 2\pi \times 4.2$ MHz et $\omega_\phi = 2\pi \times 3.8$ MHz. La signature de l'arrivée des ions aux noeuds du champ rf est la décroissance abrupte de la température T_y de 0,1 K à la limite Doppler sur la figure 5.5e. La figure 5.6 résume la chronologie des différents potentiels appliqués pour réaliser

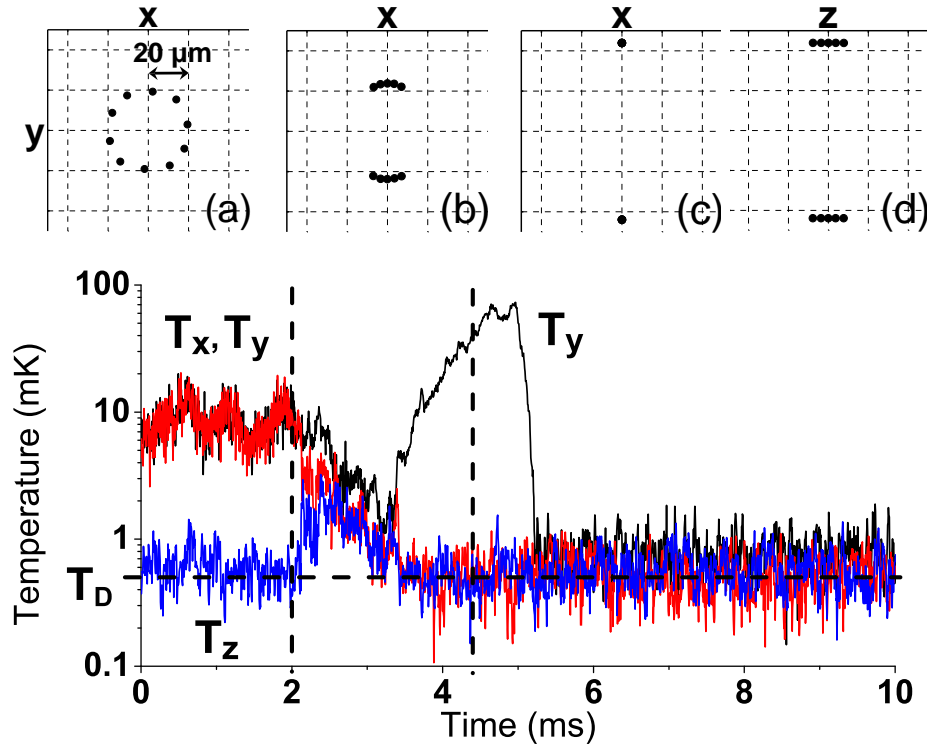


Figure 5.5 – (a)-(d) Images de la disposition des ions à trois différents instants (correspondant au graphique des températures en dessous). (e) Températures selon les trois directions du mouvement correspondant à la dynamique simulée décrite dans le texte. La ligne horizontale en tirets représente la température limite Doppler pour les ions calcium. Les lignes verticales en tirets représentent, pour la première, l'instant auquel le potentiel quadrupolaire V_4 est allumé et, pour la seconde, l'instant auquel le potentiel octupolaire statique V_{st} est allumé.

les lignes d'ions. De façon à mettre en évidence la nécessité de compenser la partie déconfinante due au confinement axial (ω_z), une rampe linéaire a été appliquée sur le potentiel statique V_{st} lors de cette simulation. Le sens de cette rampe s'inverse toute les 7 ms de façon à limiter le chauffage des ions et éviter leur déconfinement des minimums locaux supplémentaires. Il est possible de caractériser l'excès de micro-mouvement des ions lorsque la contrainte donnée par l'équation (5.11) n'est pas satisfaite, en étudiant directement la variation de la température. Ainsi, nous appliquons de nouveau une rampe linéaire sur le potentiel octupolaire statique V_{st} . La vitesse de variation de V_{st} est choisie suffisamment lente pour s'approcher de l'équilibre thermique des ions lorsque la rampe est parcourue. La température résultante est reportée sur la figure 5.7 en fonction de la valeur de V_{st} . On constate que, dans le cas présent, l'effet du

chauffage rf est inobservable sur un intervalle de 100 mV centré sur la valeur théorique. Bien que la variance sur la température soit importante, la statistique étant réalisée sur dix ions, le graphique semble indiquer qu'en moyenne, la valeur minimale obtenue de la température T_y est supérieure à la limite Doppler. La figure 5.8 présente la variation de la composante radiale de la position du centre de masse de l'une des deux lignes, lorsque la rampe est parcourue. Cette variation correspond à une variation relative d'environ 1.6 % sur la position du c.m. On constate aussi une nette diminution des fluctuations temporelles de la position du c.m. autour de 1,7 V. Un aperçu des fluctuations statistiques de la position des ions est donné en figure 5.9. Celle-ci montre les écarts types sur les positions des ions par rapport au centre de masse de chaque ligne, pour chaque direction du plan transverse du piège. On constate que, bien que la température minimale atteinte selon la direction x soit supérieure à celle atteinte selon y (cette dernière fluctuant autour de la limite Doppler), l'écart type en position selon x est néanmoins le plus petite, du fait de la forme du potentiel local pour lequel les fréquences caractéristiques des raideurs selon ces directions sont telles que $\omega_x > \omega_y$.

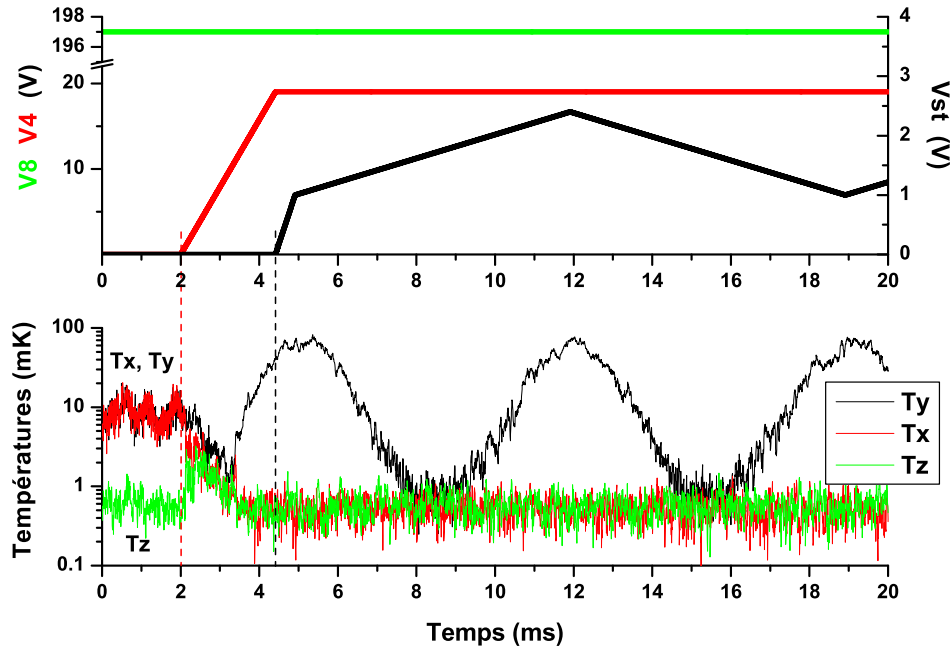


Figure 5.6 – (Haut) Amplitude des différents potentiels appliqués en fonction du temps. Sur cet exemple, une rampe linéaire est appliquée sur le potentiel statique. (Bas) Influence des tensions appliquées sur la température des 10 ions.

Une autre signature de la correspondance entre positions d'équilibre et positions de champ rf nul, et un intérêt supplémentaire de cette nouvelle organisation des ions, est l'absence de chauffage rf lorsque les lasers de refroidissement sont éteints. De plus, en modifiant l'amplitude du potentiel V_8 , et celle du potentiel statique V_{st} en conséquence, la distance inter-ligne peut être modifiée en induisant un chauffage rf très limité tant que la répulsion coulombienne peut être négligée. Si la distance inter-ligne est telle que l'interaction coulombienne ne peut être négligée, celle-ci doit être incorporée dans la condition de compensation (5.11), conduisant à la nécessité d'un potentiel statique V_{st} plus important.

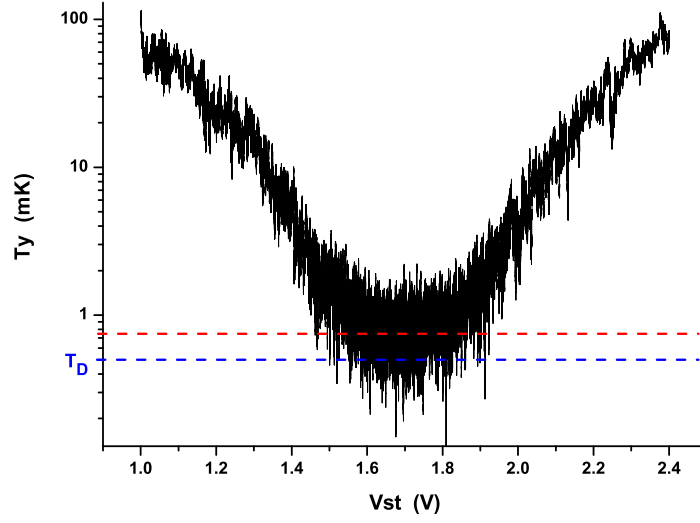


Figure 5.7 – Température T_y en fonction du potentiel statique V_{st} appliqué. La ligne horizontale en tirets bleus marque la limite Doppler, celle en tirets rouges est une indication de la température moyenne minimale obtenue.

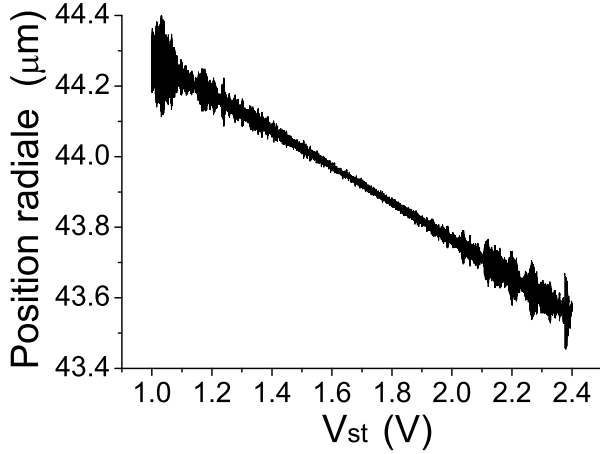


Figure 5.8

Position du centre de masse d'une des deux lignes lors du parcours de la rampe sur V_{st} .

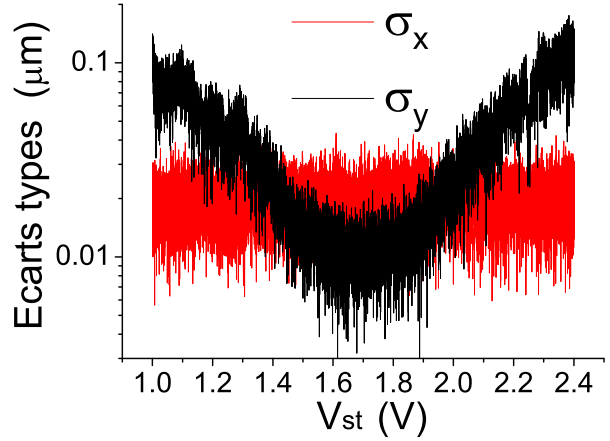


Figure 5.9

Variances sur la position des ions de chaque ligne lors du parcours de la rampe sur V_{st} .

5.3 Le cas général

Il est possible de généraliser le concept introduit précédemment. Considérons un piège linéaire $2k$ -polaire sur lequel un potentiel V_{2k} est appliqué. Un potentiel rf additionnel V_{2p} , de phase et de fréquence identiques, est superposé sur $2p$ électrodes à celui de l'octupôle. A chaque contribution radio-fréquence est associé un pseudo-potential Ψ_{2k} et Ψ_{2p} , le pseudo-potential total résultant de cette superposition s'écrit :

$$\Psi = \Psi_{2k} + \Psi_{2p} + 2\sqrt{\Psi_{2k}\Psi_{2p}} \cos((k-p)\phi). \quad (5.15)$$

Les minimums supplémentaires créés par annulation des champs électriques radio-fréquences sont localisés selon les directions $\phi_n = (2n+1)\pi/(k-p)$ (pour $\cos[(k-p)\phi] = -1$), à la distance $\mathcal{R} = \mathcal{R}_{\text{of}}$ du centre du piège, telle que :

$$\mathcal{R}_{\text{of}}^{k-p} = pV_{2p}/kV_{2k}. \quad (5.16)$$

Pour compenser la contribution déconfinante du potentiel harmonique axial aux positions des minimums du psp, un potentiel statique additionnel est requis. Ce potentiel statique doit produire un champ confinant dans les directions ϕ_n , ce qui implique que ce potentiel statique doit posséder une symétrie rotationnelle discrète d'angle $2\pi/(k-p)$ (lorsque celle d'un $2k$ -pôle est d'angle π/k). Selon le choix des ordres k et p , ce potentiel statique peut avoir un ordre de symétrie différent des deux précédents, mais une condition équivalente à l'équation (5.11) peut toujours être trouvée. Prenons pour exemple un piège linéaire dodécapolaire sur les électrodes duquel est superposé un potentiel quadrupolaire. Cette configuration génère quatre positions de champ rf nul pour lesquelles un potentiel à symétrie octupolaire ($6 - 2 = 4$) est nécessaire pour effectuer la compensation (voir figure 5.10 pour différentes configurations).

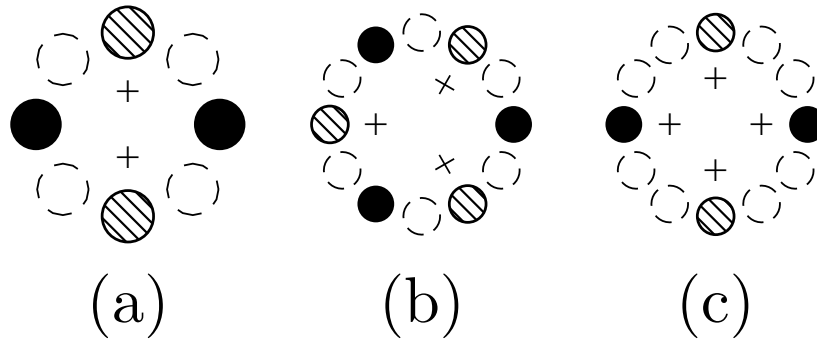


Figure 5.10 – Schéma des barreaux cylindriques de différents multipôles, pour lesquels les barreaux pleins et hachurés représentent respectivement les potentiels additionnels $-V_{2p}$ et $+V_{2p}$ à l'instant $t = 0$. Les croix intérieures marquent les positions supplémentaires de champ rf nul d'un (a) piège octupolaire avec un potentiel quadrupolaire additionnel, (b) dodécapôle avec un potentiel hexapolaire, and (c) dodécapôle avec un potentiel quadrupolaire.

L'ordre de symétrie du potentiel statique V_{st} doit être un multiple de $(k-p)$. Pour le cas introduit dans la section précédente, nous avons utilisé l'ordre 4 du potentiel octupolaire : $s = 2(k-p) = 4$. Ce choix a une influence sur les fréquences caractéristiques du mouvement des ions positionnés dans les minimums locaux. L'ordre le plus bas du développement en série du potentiel effectif de confinement permet une généralisation des équations (5.12) et (5.13) :

$$\omega_r^2 = 2(k-p)^2 \frac{\psi_{2p}}{m r_0^2} \mathcal{R}_{\text{of}}^{2p-4} + (s-2) \frac{\omega_z^2}{2}, \quad (5.17)$$

$$\omega_\phi^2 = 2(k-p)^2 \frac{\psi_{2p}}{m r_0^2} \mathcal{R}_{\text{of}}^{2p-4} - s \frac{\omega_z^2}{2}. \quad (5.18)$$

Le choix d'un ordre s supérieur à celui strictement requis par la symétrie du système peut être justifié par la nécessité d'obtenir une dissymétrie plus prononcée des fréquences caractéristiques ω_r et ω_ϕ . Cela peut être utilisé pour contrôler la morphologie des sous-ensembles d'ions (chaîne, zig-zag,...), aux dépens du potentiel statique dont l'amplitude nécessaire à la

compensation se comporte en $1/(s\mathcal{R}_{\text{of}}^{s-2})$. Ainsi que nous l'avons déjà mentionné, l'utilisation d'un potentiel statique quadrupolaire ($s = 2$) permet théoriquement l'utilisation d'un potentiel de compensation constant quelle que soit la distance relative \mathcal{R}_{of} .

Le but n'étant pas de faire une zoologie, signalons qu'il est aussi possible de superposer le potentiel rf additionnel sur les électrodes permettant le confinement axial. La dépendance radiale du potentiel additionnel est alors de la forme $-r^2$, et ne dépend pas de l'angle ϕ . Cette configuration a l'avantage de générer k noeuds dans le champ rf d'un multipôle d'ordre k , mais réduit les zones de champs nuls à des points dans le plan $z = 0$.

5.4 Potentiel généré par un piège réaliste

Jusqu'à présent, nous avons considéré des potentiels électriques de géométries idéales. Lorsqu'un piège multipolaire linéaire est réalisé au moyen d'électrodes cylindriques, le champ généré possède des ordres supérieurs à celui du multipôle. Il est cependant possible d'optimiser l'ordre le plus bas (celui du multipôle) par un choix approprié du rayon du piège et du rayon des électrodes [30]. Cependant, lorsqu'un potentiel d'ordre inférieur à celui du piège est connecté sur les barreaux, deux facteurs contribuent à écarter la forme du champ généré de la forme idéale. Tout d'abord, il n'est plus possible d'optimiser l'ordre le plus bas, car cela nécessiterait des barreaux dont le diamètre est supérieur à la distance inter-axes des barreaux. La seconde contribution est due aux électrodes non-connectées au potentiel additionnel. Du point de vue de ce potentiel, ces barreaux sont équivalents à des électrodes mises à la masse, et font dévier de façon importante la forme du champ généré de la forme idéale.

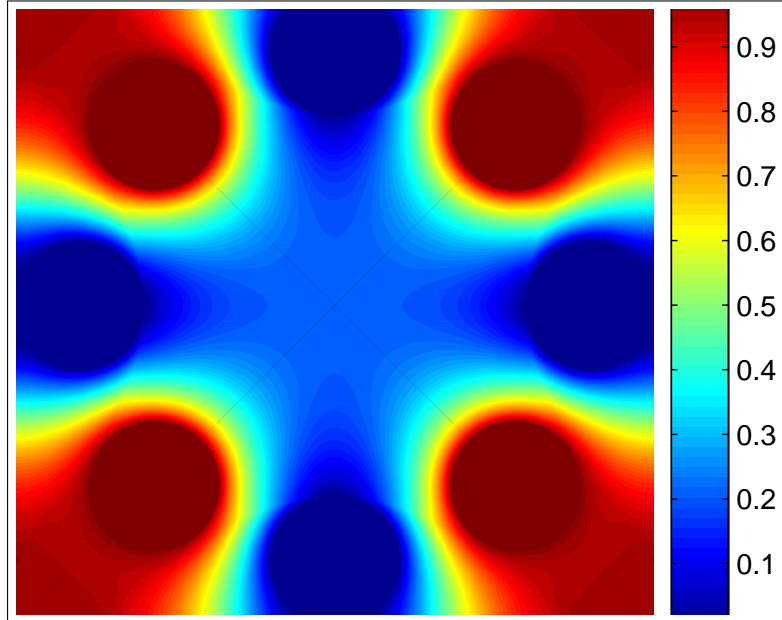


Figure 5.11 – Différence relative $(U_4 - \tilde{U}_4)/\tilde{U}_4$ entre le potentiel électrique généré par l'octupôle U_4 et celui généré en l'absence des quatre barreaux non connectés, \tilde{U}_4 ; les barreaux non connectés étant situés dans les diagonales de l'image. Calculs réalisés au moyen du logiciel SIMION par J. Pedregosa-Gutierrez.

Nous illustrons ces effets sur l'exemple traité dans la première section de ce chapitre. Le

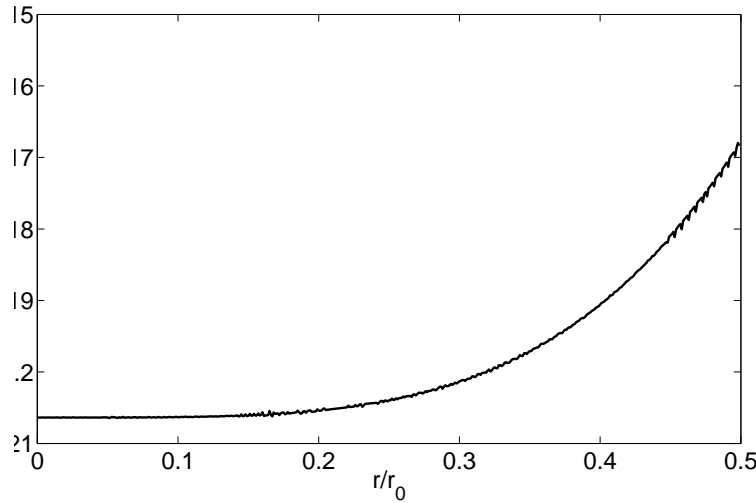


Figure 5.12 – Différence relative entre le champ électrique quadrupolaire réel généré par l’octupôle, E_r , et le champ idéal, E_{id} , en fonction de la distance réduite \mathcal{R} selon la direction $\phi_{\pm 1}$.

logiciel SIMION [103] permet de calculer un champ électrique à partir de la géométrie des électrodes. Le calcul du champ électrique, réalisé par Jofre Pedregosa-Gutierrez, est mené pour un octupôle formé d’électrodes cylindriques de rayon $r_0/3$. Cette caractéristique est la condition permettant l’optimisation de l’ordre octupolaire du potentiel de confinement [30]. L’optimisation de cet ordre n’est pas la solution convenable pour minimiser la déformation de la forme du champ quadrupolaire, et un compromis entre l’optimisation des ordres quadrupolaire et octupolaire est sans doute à définir. Cependant, nous ne souhaitons pas mener cette étude pour le moment et prenons le parti de travailler sur la géométrie d’un piège octupolaire tel qu’il serait conçu pour une utilisation standard. Le rayon intérieur du piège est pris égal à $r_0 = 0.2$ mm, valeur utilisée pour les simulations de dynamique moléculaire. Seul le potentiel V_4 est appliqué sur quatre des huit barreaux de l’octupôle.

Dans un premier temps, nous comparons le potentiel électrique quadrupolaire généré par le multipôle, U_4 , à celui généré en l’absence des quatre barreaux non connectés, \tilde{U}_4 . La figure 5.11 présente la différence relative $(U_4 - \tilde{U}_4)/\tilde{U}_4$ dans le plan transverse du piège. Les huit électrodes sont apparentes et celles situées dans les diagonales, non connectées à V_4 , perturbent de façon importante le potentiel. La dynamique des ions est restreinte aux abords de l’axe Oy , le long duquel le potentiel connaît des variations relatives allant jusqu’à 25%. Les deux fines lignes diagonales, apparentes sur la figure, sont des lieux où la différence entre les deux potentiels s’annule du fait des propriétés de symétrie du système. En figure 5.12 est tracée la différence normalisée entre le champ quadrupolaire réel généré par l’octupôle, E_r , et le champ idéal dérivant d’un potentiel harmonique, E_{id} , en fonction de la distance réduite \mathcal{R} selon la direction $\phi_{\pm 1}$. Cette valeur est constante dans la partie centrale du piège ($r < r_0/5$) où, augmentant l’amplitude du champ E_r de 20%, les champs peuvent être considérés comme identiques. Dans l’exemple que nous avons utilisé dans la première partie, l’anneau d’ions de la figure 5.5 s’étend sur un dixième de la dimension intérieure du piège. La figure 5.12 montre de plus que la condition de l’équation (5.11) devient dépendante de la position également pour un potentiel statique V_{st} quadrupolaire, et justifie ainsi l’emploi d’un potentiel statique octupolaire, dont la forme peut être optimisée, si des positions supérieures à $r_0/5$ sont requises.

Pour déterminer si la dynamique obtenue précédemment avec des potentiels idéaux peut

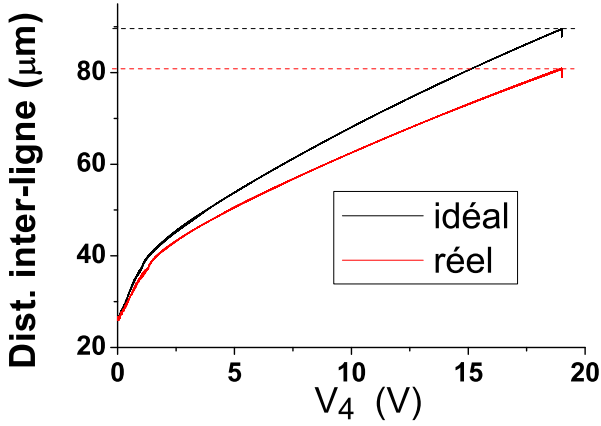


Figure 5.13

Distances relatives des centres de masse des deux sous-ensembles d'ions en fonction potentiel V_4 appliqué.

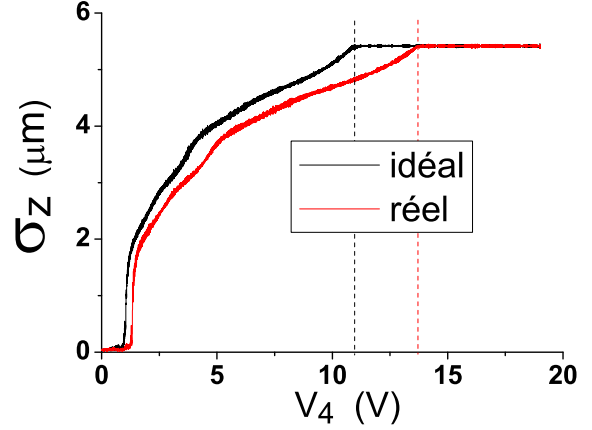


Figure 5.14

Écarts types de la position des ions selon la direction z en fonction du potentiel V_4 .

être obtenue dans la pratique, nous remplaçons dans la simulation de dynamique moléculaire, le potentiel quadrupolaire idéal par le fit polynômial [30, 104, 105] effectué jusqu'à $r_0/2$, U_{fit} , obtenu du potentiel calculé au moyen de SIMION. Celui-ci est donné par :

$$U_{\text{fit}} = a_0 + a_2 \Re\{(\tilde{r}/r_0)^2\} + a_6 \Re\{(\tilde{r}/r_0)^6\} + a_{10} \Re\{(\tilde{r}/r_0)^{10}\} + a_{14} \Re\{(\tilde{r}/r_0)^{14}\} \quad (5.19)$$

avec, $a_1 = 2,8896$, $a_2 = -7,9554 \times 10^{-1}$, $a_6 = -1,9511 \times 10^{-1}$, $a_{10} = -3,4580 \times 10^{-3}$, $a_{14} = 5,1646 \times 10^{-3}$ et $\tilde{r} = x + iy$. Les simulations de dynamique moléculaire utilisant le fit du potentiel quadrupolaire montrent que la même procédure pour créer les deux lignes d'ions, les amener aux noeuds du champ rf et les refroidir par laser jusqu'à la limite Doppler peut être réalisée.

Sur les figures 5.13 et 5.14 sont comparés les effets des potentiels quadrupolaires idéal et "réel", lorsque les mêmes conditions initiales sont utilisées. La figure 5.13 montre que les deux sous-ensembles d'ions peuvent être séparés et confinés indépendamment dans les deux minimums locaux. Cependant, on constate qu'il est nécessaire d'appliquer un potentiel V_4 de l'ordre de 20 % supérieur pour obtenir la même distance inter-ligne que dans le cas idéal.

Sur la figure 5.14, nous comparons les écarts types dans la direction z de la position des ions composant chaque ligne. L'écart type constitue uniquement un indicateur permettant de déterminer le potentiel V_4 minimal pour lequel les lignes d'ions sont parfaitement formées. Cela se traduit par l'apparition d'un plateau, indiquant que les ions sont étalés de façon maximale le long de la direction z . La figure montre que ce plateau s'obtient de la même façon dans le potentiel réaliste, seule l'amplitude du potentiel pour laquelle celui-ci apparaît est différente et reflète encore une augmentation nécessaire de 20 %. Les ions possédant une organisation sous forme de ligne dans chaque potentiel, nous montrons en figure 5.15 qu'il est encore possible de les refroidir jusqu'à la température limite Doppler lorsqu'un potentiel statique (octupolaire) permet la correspondance entre la position d'équilibre et la position de champ rf nul. La rampe appliquée ici est beaucoup plus rapide qu'en figure 5.7, et ne permet pas de s'assurer d'un quasi-équilibre thermique lors du parcours de la rampe. On constate néanmoins que les températures minimales accessibles semblent équivalentes dans les deux cas, mais les lignes d'ions étant plus près de l'origine dans le cas réaliste, un potentiel statique V_{st} supérieur est nécessaire dans ce cas. De la même façon, si les lignes d'ions se trouvaient à des distances identiques du centre du piège, par l'emploi d'un potentiel V_4 plus important dans le cas réaliste, les V_{st} employés

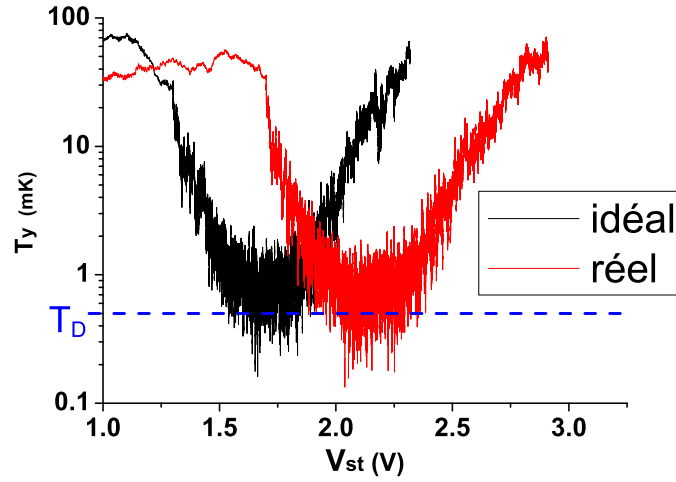


Figure 5.15 – Température T_y en fonction du potentiel statique V_{st} appliqué. La ligne horizontale en tirets bleus marque la limite Doppler.

dans les deux cas auraient été identiques. Remarquons de surcroît que, bien que l’augmentation nécessaire du potentiel V_4 dans le cas réaliste soit de l’ordre de 20 % par rapport au cas idéal, cela ne représente que quelques volts en valeur absolue dans le cas présent.

5.5 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons montré que superposer un potentiel électrique rf d’ordre inférieur à celui d’un piège multipolaire permet de créer des noeuds supplémentaires dans le champ radio-fréquence. Un ensemble d’ions peut alors être séparé en plusieurs sous-ensembles de façon contrôlée, et refroidi par laser jusqu’à la limite Doppler. Une fois refroidi, chaque sous-ensemble peut être considéré confiné dans un potentiel harmonique 3D anisotrope, dont la morphologie peut être contrôlée de la même façon qu’au sein d’un piège quadrupolaire linéaire. Cette possibilité ouvre la voie à la création de lignes d’ions parallèles avec un large choix de géométries selon les ordres multipolaires utilisés. La distance entre les minimums supplémentaires du pseudo-potentiel peut être continûment variée jusqu’à obtenir des conditions telles que la répulsion coulombienne entre les sous-ensembles d’ions permette un couplage suffisant pour influencer leurs positions d’équilibre.

Perspectives

*“ Il faudrait changer les héros,
dans un monde où le plus beau reste à faire.”*
D. Balavoine

Le travail effectué lors de cette thèse porte sur la compréhension de la dynamique des ions en piège radio-fréquence. A cette occasion, le programme informatique baptisé ITraPS, présenté dans le chapitre 2, utilisant la technique de la dynamique moléculaire, a été élaboré dans le but de simuler des ensembles d’ions en pièges rf, et une modélisation du refroidissement laser Doppler a été implémentée. L’utilisation d’un programme informatique permet d’accéder à différentes propriétés qui sont difficilement accessibles, voire non accessibles, par l’expérimentation.

Une des ambitions du programme ITraPS est de pouvoir effectuer des simulations impliquant un très grand nombre d’ions. Cette nécessité est motivée par les récentes expériences, de plus en plus nombreuses, concernant le développement de mémoires quantiques ou de répéteurs quantiques par exemples, dans lesquelles les états quantiques sont stockés dans les états internes des ions piégés, dont le nombre peut varier de quelques milliers à plusieurs millions, ou encore les expériences liées à l’étude de l’état thermodynamique des ensembles d’ions, pour lesquelles des grands nombres d’ions sont requis. L’expertise de tels systèmes au moyen de simulations numériques peut s’avérer extrêmement utiles pour contraindre les paramètres des expériences, ou déterminer l’effet des grands nombres d’ions sur le chauffage rf des structures froides, phénomène non-linéaire limitant l’efficacité des systèmes d’ions piégés pour ce type d’application. Cependant, du fait de l’interaction coulombienne qui engendre un nombre de calculs quadratique avec le nombre d’ions, ce dernier se voit rapidement limité par la puissance de calcul. Pour cela nous avons effectué la parallélisation du programme en utilisant la bibliothèque OMP. Celle-ci permet de distribuer les calculs sur les différents processeurs d’une même machine. Il est difficile d’évaluer le nombre d’ions auquel donne accès cette parallélisation, car la faisabilité d’une étude numérique particulière dépend non seulement du nombre d’ions mais aussi des différentes échelles de temps caractérisant le système à l’étude. Nous pouvons évaluer entre 1.000 et 100.000, le nombre d’ions maximal que l’on peut espérer atteindre avec cette parallélisation et un ordinateur équipé de 8 processeurs tel que celui utilisé au cours de cette thèse.

Une récente collaboration avec P. Génésio a permis de ré-écrire le programme de façon à l’adapter à MPI, cette dernière offrant la possibilité de distribuer les calculs entre différents ordinateurs d’un réseau, donnant accès au traitement massivement parallèle. Ainsi, le nombre de processeurs disponibles n’est plus limité à ceux se trouvant sur une même carte mère, et le programme peut être configuré pour l’utilisation en centre de calcul. Bien que MPI soit à même de gérer la distribution du calcul entre différentes machines et différents processeurs

d'une même machine, l'étape suivante consiste à implémenter une parallélisation hybride, permettant l'utilisation d'OMP localement sur chaque ordinateur (OpenMPI), de façon à limiter les échanges de mots mémoires entre processeurs locaux et augmenter la rapidité de calcul.

Enfin, une perspective enthousiasmante est l'utilisation de cartes graphiques (à architecture de type CUDA) pour effectuer la parallélisation. Ces dernières permettent d'obtenir un très grand nombre de processeurs à faible coût (une unique carte offre environ 500 processeurs pour 400 euros actuellement...) permettant un accès au calcul massivement parallèle au sein d'une même machine.

A plus long terme, je souhaiterais coupler la technique de la dynamique moléculaire, permettant de calculer la dynamique externe des ions, à une méthode de résolution des équations de Bloch optiques, de façon à pouvoir évaluer l'influence des différents couplages d'un ion à son environnement sur l'évolution de son état interne. Cela permettrait de simuler des protocoles d'information quantique en pièges rf, ou encore de décrire la dynamique interne d'ions couplés à une cavité QED.

Les simulations numériques réalisées avec ce programme ont permis d'effectuer plusieurs études, partant de la dynamique d'ions en piège d'ordre quadrupolaire originel, jusqu'à la dynamique au sein de pièges multipolaires d'ordres supérieurs au quadrupôle, encore peu étudiée jusqu'à présent.

La première étude présentée dans le chapitre 3 de ce manuscrit s'est intéressée à la dynamique d'ensembles d'ions confinés dans un quadrupôle linéaire, lorsque les ions sont soumis à un unique faisceau laser de refroidissement. Cette étude nous a permis d'observer qu'un refroidissement effectif des structures est obtenu uniquement lorsque ces dernières possèdent une étendue tridimensionnelle. Ce comportement met en évidence le rôle de l'interaction coulombienne, à travers la morphologie des structures, dans le refroidissement des ions. Lorsque les conditions de confinement sont telles que la structure obtenue à basse température possède une extension tridimensionnelle, toutes les directions du mouvement des ions sont couplées entre elles par l'interaction coulombienne. Cependant, pour certaines conditions de confinement, les structures obtenues ne sont pas d'extension tridimensionnelle, et les différentes directions du mouvement des ions peuvent être découplées les unes des autres, en fonction de la forme de la structure.

Lors de la réalisation de cette étude, nous avons observé deux types de rotations des structures d'ions, qui sont jusqu'à présent restées inexplicées. Dans un premier temps, nous avons observé une rotation des structures obtenues dans le pseudo-potentiel, lorsque le refroidissement laser est appliqué dans un pseudo-potentiel où la symétrie cylindrique est brisée par un potentiel quadrupolaire statique ($a_u \neq 0$). Le second type de rotation se produit en potentiel rf, et conduit au déconfinement des ions. Un travail commencé pour expliquer la rotation survenant en pseudo-potentiel laisse penser que le centre de masse joue un rôle privilégié dans ce phénomène. Concernant la rotation survenant dans le potentiel rf, une première étape pour arriver à une compréhension du phénomène pourrait être d'étudier plus en détail l'influence de la température sur le déclenchement de la rotation.

La deuxième étude présentée dans le chapitre 4 concerne la dynamique des structures obtenues pour de faibles nombres d'ions dans les multipôles linéaires d'ordres supérieurs au quadrupôle. Les morphologies des structures permises par le potentiel de confinement de ce type de piège sont alors très différentes de celles permises par les quadrupôles. Pour de faibles nombres

d'ions, les structures sont des systèmes en double anneaux d'ions ou en unique anneau plan. Après avoir déterminé une condition d'équilibre permettant l'obtention des structures en anneau plan, nous avons comparé les propriétés thermiques de ces deux types de structures. Nous avons montré que, dans le cas d'une configuration en anneau plan, le découplage de la direction axiale du mouvement des ions permet l'obtention de la température limite Doppler selon cette direction lorsque le refroidissement laser est appliqué. De plus, nous avons observé que pour des nombres d'ions suffisamment faibles, ces structures ne présentent aucun signe de réchauffement lorsque le refroidissement laser est arrêté pendant plusieurs dizaines de millisecondes.

Au cours de cette étude, nous avons mis en évidence l'inaptitude de l'approche du pseudo-potentiel à décrire certaines structures obtenues numériquement en utilisant le potentiel rf d'un octupôle linéaire (cf. chapitre 4). Cela permet de s'interroger sur l'existence d'un second ordre du pseudo-potentiel. L'hypothèse émise pour expliquer ces structures reste à vérifier et sera l'objet d'une prochaine étude. La caractérisation de la dynamique des structures en anneaux d'ions, lorsque celles-ci ne sont pas soumises à un refroidissement laser permanent, permettrait de déterminer des comportements caractéristiques et d'éventuelles lois d'échelles gouvernant la dynamique de telles structures.

La dernière étude présentée dans le chapitre 5 de ce manuscrit propose un moyen de créer des noeuds supplémentaires dans le champ rf des multipôles linéaires d'ordres supérieurs, par la superposition d'un champ rf d'ordre différent. Chaque noeud du champ rf engendrant un puits de pseudo-potentiel, cela donne la possibilité d'y confiner des ions uniques, ou des lignes d'ions, répartis selon une configuration dépendant de l'ordre du multipôle et de l'ordre du champ rf supplémentaire employé, sans que les ions subissent le forçage rf.

Dans cette étude, n'avons pas tenu compte des interactions entre les ions occupant des noeuds différents, car ces interactions étaient alors négligeables. Cependant, la position relative des noeuds étant un paramètre modifiable, il est possible de créer des configurations pour lesquelles on ne peut plus faire une telle approximation. Il serait donc intéressant de les prendre en considération, et d'étudier les corrélations inter-sites possibles. Lors de cette étude, nous avons formé des lignes d'ions à partir d'un anneau d'ions froids. Cependant, il serait intéressant d'étudier la dynamique d'un nuage d'ions chauds dans ce type de potentiel. Une étude intéressante serait de déterminer s'il est possible de passer de façon continue d'une structure d'ions froids formant des tubes concentriques évoluant dans le potentiel rf du multipôle, à deux structures séparées se trouvant chacune centrée sur un noeud du champ rf, par l'application progressive du potentiel additionnel.

D'autres études envisagées n'ont pu être réalisées pendant le temps qui m'était imparti pour effectuer cette thèse. Entre autres, un sujet concernant les pièges multipolaires d'ordres supérieurs, sujet dont nous avons d'ailleurs commencé l'étude, semble prometteur. Il s'agit d'analyser la possibilité d'opérer le refroidissement sympathique en piège multipolaire linéaire. Pour ce type de refroidissement, deux espèces différentes sont présentes dans le piège. Une première espèce est soumise à un refroidissement laser Doppler, qui en permet un refroidissement très efficace, alors que la seconde, qui peut être une espèce moléculaire par exemple, n'y est pas sensible. Cependant, cette seconde espèce peut être refroidie du fait de l'interaction coulombienne, qui permet un échange d'énergie entre les deux espèces. Plusieurs études ont déjà été effectuées en géométrie quadrupolaire [29, 106], pour laquelle chaque espèce voit un pseudo-potentiel de raideur différente en fonction de sa masse (cf. chapitre 1), mais toutes voient le minimum au centre du piège. Les deux espèces restent donc proches l'une de l'autre. Il

n'en est pas de même en multipôles d'ordres supérieurs, pour lesquels la position du minimum du pseudo-potentiel, R_{min} , dépend de la masse (voir figure 5.16). Ainsi, un écart suffisamment important entre les masses des deux espèces peut résulter en un couplage coulombien diminué, du fait de la distance relative des minimums de leur pseudo-potentiel respectif, rendant inefficace le refroidissement sympathique.

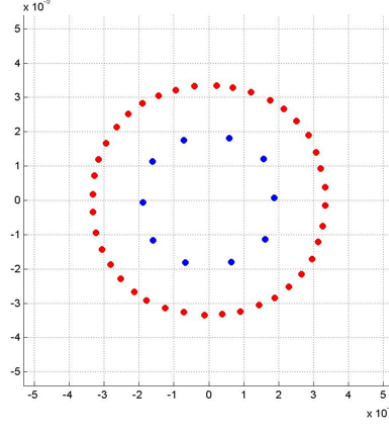


Figure 5.16 – Vue selon l'axe longitudinal d'un piège octupolaire, d'un anneau de 10 ions calcium (de masse $m_{Ca} = 40$ a.m.u. au centre) refroidis par laser, et refroidissant sympathiquement une structure en double anneau formée de 40 ions de masse $m = 306$ u.m.a. L'image montre une étendue de $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$.

Une autre étude consiste à déterminer s'il est possible de réaliser un système de vis sans fin agissant sur les structures en anneau d'ions dans les multipôles d'ordres supérieurs. En effet, la superposition de deux faisceaux lasers contra-propageants de fréquences identiques donne lieu à une onde stationnaire. Cependant, si les fréquences des deux lasers diffèrent d'une faible valeur $\Delta\omega$, cela a pour conséquence de déplacer le motif de l'onde stationnaire à une vitesse constante. Or, la force dipolaire électrique, due à l'interaction des atomes avec le rayonnement, tend à positionner ces derniers dans les ventres de l'onde. Ainsi, il est possible d'imaginer un schéma dans lequel les faisceaux lasers affleurent l'anneau d'ions par un seul côté. Les atomes, du fait de la force réactive induite par le rayonnement, seraient alors entraînés par le mouvement des ventres de l'onde. De même, si la structure est un double anneau, l'interaction de cet arbre électromagnétique sur la roue dentée que constitue un des anneaux, permettrait d'entraîner le second anneau, ou même un tube entier. L'utilisation d'un rayonnement laser dans le but d'induire des rotations a déjà été effectuée expérimentalement par M. Drewsen *et al.* [107, 108] dans un piège quadrupolaire linéaire. Dans ces expériences, la rotation est induite par un unique laser, utilisant le transfert d'impulsion dû à l'absorption de photons par les atomes. Une vitesse de rotation stationnaire est obtenue lorsque la vitesse de rotation est telle que les atomes sortent de la résonance avec l'onde laser. Dans le schéma proposé ici, la vitesse de rotation est directement reliée à la vitesse des déplacements du motif stationnaire, ce qui permettrait un contrôle précis de la vitesse de rotation par la différence de fréquence $\Delta\omega$. Cependant, bien que, lors de la rotation, les ions constituant l'anneau se déplacent selon les équipotentielles du pseudo-potentiel, la faiblesse de la force dipolaire peut s'avérer rédhibitoire pour cette application.

Bibliographie

- [1] W. Paul, *Electromagnetic traps for charged and neutral particles*, Rev. Mod. Phys. **62**, 531 (1990).
- [2] J.D. Prestage, G.J. Dick, et L. Maleki, *New ion trap for frequency standard applications*, J. Appl. Phys. **66**, 1013 (1989).
- [3] T.W. Hänsch et A.L. Schawlow, *Cooling of gases by laser radiation*, Opt. Commun. **13**, 68 (1975).
- [4] D.J. Wineland et H. Dehmelt, *Proposed 10^{14} $\Delta\nu < \nu$ laser fluorescence spectroscopy on Tl^+ Mono-Ion Oscillator III*, Bull. Am. Phys. Soc. **20**, 637 (1975).
- [5] D.J. Wineland, R.E. Drullinger, et F.L. Walls, *Radiation-pressure cooling of bound resonant absorbers*, Phys. Rev. Lett. **40**, 1639 (1978).
- [6] W. Neuhauser, M. Hohenstatt, P. Toschek, et H. Dehmelt, *Optical-sideband cooling of visible atom cloud confined in parabollic well*, Phys. Rev. Lett. **41**, 233 (1978).
- [7] R.F. Wuerker, H. Shelton, et R.V. Langmuir, *Electrodynamic containment of charged particles*, J. Appl. Phys. **30**, 342 (1959).
- [8] F. Diedrich, E. Peik, J.M.Chen, W. Quint, et H. Walther, *Observation of a phase transition of stored laser-cooled ions*, Phys. Rev. Lett. **59**, 2931 (1987).
- [9] I. Waki, S. Kassner, G. Birkel, et H. Walther, *Observation of ordered structures of laser-cooled ions in a quadrupole storage ring*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2007 (1992).
- [10] D.H.E. Dubin, *Theory of structural phase transitions in a trapped Coulomb crystal*, Phys. Rev. Lett. **71**, 2753 (1993).
- [11] J. Schiffer, *Phase transitions in anisotropically confined ionic crystals*, Phys. Rev. Lett. **70**, 818 (1993).
- [12] S.A. Diddams, T. Udem, J.C. Bergquist, E.A. Curtis, R.E. Drullinger, L. Hollberg, W.M. Itano, W.D. Lee, C.W. Oates, K.R. Vogel, et al., *An optical clock based on a single trapped $^{199}\text{Hg}^+$ ion*, Science **293**, 825 (2001).
- [13] H.S. Margolis, G.P. Barwood, G. Huang, H.A. Klein, S.N. Lea, K. Szymaniec, et P. Gill, *Hertz-level measurement of the optical clock frequency in a single $^{88}\text{Sr}^+$ ion*, Science **306**, 1355 (2004).
- [14] H.S. Margolis, *Frequency metrology and clocks*, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **42**, 154017 (2009).

- [15] S.N. Lea, *Limits to time variation of fundamental constants from comparisons of atomic frequency standards*, Rep. Prog. Phys. **70**, 1473 (2007).
- [16] S. Willitsch, M.T. Bell, A.D. Gingell, et T.P. Softley, *Chemical applications of laser- and sympathetically-cooled ions in ion traps*, Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 7200 (2008).
- [17] R. Wester, *Radiofrequency multipole traps : tools for spectroscopy and dynamics of cold molecular ions*, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **42**, 154001 (2009).
- [18] J.I. Cirac et P. Zoller, *Quantum computations with cold trapped ions*, Phys. Rev. Lett. **74**, 4091 (1995).
- [19] M. Sasura et V. Buzek, *Cold trapped ions as quantum information processors*, Journal of Modern Optics **49**, 1593 (2002).
- [20] T. Coudreau, *Recent experiments in quantum information with trapped ions*, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **42**, 154011 (2009).
- [21] R.P. Feynman, *Simulating physics with computers*, Int. J. Theor. Phys. **21**, 467 (1982).
- [22] M. Johanning, A.F. Varon, et C. Wunderlich, *Quantum simulations with cold trapped ions*, J. Phys B **42**, 154009 (2009).
- [23] A. Rahman et J.P. Schiffer, *Structure of a one-component plasma in an external field : a molecular-dynamics study of particle arrangement in a heavy-ion storage ring*, Phys. Rev. Lett. **57**, 1133 (1986).
- [24] R.W. Hasse et V.V. Avilov, *Structure and Madelung energy of spherical Coulomb crystals*, Phys. Rev. A **44**, 4506 (1991).
- [25] M. Drewsen, C. Brodersen, L. Hornekær, J.S. Hangst, et J.P. Schiffer, *Large ion crystals in a linear Paul trap*, Phys. Rev. Lett. **81**, 2878 (1998).
- [26] L. Hornekær, N. Kjærgaard, A.M. Thommesen, et M. Drewsen, *Structural properties of two-component Coulomb crystals in linear Paul traps*, Phys. Rev. Lett. **86**, 1994 (2001).
- [27] R. Blümel, C. Kappler, W. Quint, et H. Walther, *Chaos and order of laser-cooled ions in a Paul trap*, Phys. Rev. A **40**, 808 (1989).
- [28] J.D. Prestage, A. Williams, L. Maleki, M.J. Djomehri, et E. Harabetian, *Dynamics of charged particles in a Paul radio-frequency quadrupole trap*, Phys. Rev. Lett. **66**, 2964 (1991).
- [29] S. Schiller et C. Lammerzahl, *Molecular dynamics simulation of sympathetic crystallization of molecular ions*, Phys. Rev. A **68**, 053406 (2003).
- [30] A.N. Kononkov, D.J. Douglas, et N.V. Kononkov, *Spatial harmonics of linear multipoles with round electrodes*, Int. J. Mass Spectrometry **289**, 144 (2010).
- [31] J.P. Carrico, *Applications of inhomogeneous oscillatory electric fields in ion physics*, Dyn. Mass. Spectrom. **3**, 1 (1972).
- [32] P. Ghosh, *Ion Traps* (Oxford Science Publications, 1995).

- [33] D. Gerlich, *Inhomogeneous rf-fields - A versatile tool for the study of processes with slow ions*, Advances in Chemical Physics **82**, 1 (1992).
- [34] N.W. McLachlan, *Theory and application of Mathieu functions* (Dover Publications, 1964).
- [35] L. Ruby, *Applications of the Mathieu equation*, Am. J. Phys. **64**, 39 (1996).
- [36] H.G. Dehmelt, *Radiofrequency spectroscopy of stored ions I : storage*, Advances in Atomic and Molecular Physics **3**, 53 (1967).
- [37] M. Drewsen et A. Brøner, *Harmonic linear Paul trap : Stability diagram and effective potentials*, Phys. Rev. A **62**, 045401 (2000).
- [38] V.L. Ryjkov, X. Zhao, et H.A. Schuessler, *Simulations of the rf heating rates in a linear quadrupole ion trap*, Phys. Rev A **71**, 033414 (2005).
- [39] F. Vedel, *On the dynamics and energy of ion clouds stored in an rf quadrupole trap*, Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc. **106**, 33 (1991).
- [40] E. Teloy et D. Gerlich, *Integral cross sections for ion-molecule reactions : I. The guided beam technique*, Chem. Phys. **4**, 417 (1974).
- [41] J. Mikosch, U. Fruehling, S. Trippel, D. Schwalm, M. Weidemueller, et R. Wester, *Evaporation of buffer-gas-thermalized anions out of a multipole rf ion trap*, Phys. Rev. Lett. **98**, 223001 (2007).
- [42] J. Mikosch, U. Fruehling, S. Trippel, R. Otto, P. Hlavenka, D. Schwalm, M. Weidemueller, et R. Wester, *Evaporation of trapped anions studied with a 22-pole ion trap in tandem time-of-flight configuration*, Phys. Rev. A **78**, 023402 (2008).
- [43] J.D. Prestage, R.L. Tjoelker, et L. Maleki, *Recent developments in microwave ion clocks*, Topics in Applied Physics 79, Frequency Measurement and Control p. 195 (2001).
- [44] C. Champenois, *About the dynamics and thermodynamics of trapped ions*, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **42**, 154002 (2009).
- [45] K. Okada, K. Yasuda, T. Takayanagi, M. Wada, H.A. Schuessler, et S. Ohtani, *Crystallization of Ca^+ ions in a linear rf octupole ion trap*, Phys. Rev. A **75**, 033409 (2007).
- [46] D.J. Wineland, J.C. Bergquist, W.M. Itano, J.J. Bollinger, et C.H. Manney, *Atomic-ion Coulomb clusters in an ion trap*, Phys. Rev. Lett. **59**, 2935 (1987).
- [47] J. Schiffer, *Layered structure in condensed, cold, one-component plasmas confined in external fields*, Phys. Rev. Lett. **61**, 1843 (1988).
- [48] E. Hairer, C. Lubich, et G. Wanner, *Geometric numerical integration. Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations* (Springer-Verlag, 2006).
- [49] B. Semelin, *Programmation parallèle pour le calcul scientifique* (aramis.obspm.fr/ semelin/enseignement.html, 2008).
- [50] S. Meloni, A. Federico, et M. Rosati, dans *Fifth European Workshop on OpenMP (EWOMP), 22-23 September 2003, Aachen, Germany* (2003).

- [51] A. Kastler, *Quelques suggestions concernant la production optique et la détection optique d'une inégalité de population des niveaux de quantification spatiale des atomes. Application à l'expérience de Stern et Gerlach et à la résonance magnétique.*, J. Phys. Rad. **11**, 255 (1950).
- [52] H.J. Metcalf et P. Van Der Straten, *Laser Cooling and Trapping* (Springer, 1999).
- [53] C. Cohen-Tannoudji, *Laser cooling and trapping of neutral atoms : theory*, Phys. Rep. **219**, 153 (1992).
- [54] C. Cohen-Tannoudji, *Manipulating atoms with photons*, Rev. Mod. Phys. **70**, 707 (1998).
- [55] F. Diedrich, J.C. Bergquist, W.M. Itano, et D.J. Wineland, *Laser cooling to the zero-point energy of motion*, Phys. Rev. Lett. **62**, 403 (1989).
- [56] G. Morigi, J. Eschner, J.I. Cirac, et P. Zoller, *Laser cooling of two trapped ions : Sideband cooling beyond the Lamb-Dicke limit*, Phys. Rev. A **59**, 3797 (1999).
- [57] P.D. Lett, W.D. Phillips, S.L. Rolston, C.E. Tanner, R.N. Watts, et C.I. Westbrook, *Optical Molasses*, JOSA B **6**, 2084 (1989).
- [58] P.J. Ungar, D.S. Weiss, E. Riis, et S. Chu, *Optical molasses and multilevel atoms : theory*, JOSA B **6**, 2058 (1989).
- [59] Y. Castin et J. Dalibard, *Quantization of atomic motion in optical molasses*, Europhys. Lett. **14**, 761 (1991).
- [60] C.S. Adams et E. Riis, *Laser cooling and trapping of neutral atoms*, Prog. Quant. Electr. **21**, 1 (1997).
- [61] S. Chu, J.E. Bjorkholm, A. Ashkin, et A. Cable, *Experimental observation of optically trapped atoms*, Phys. Rev. Lett. **57**, 314 (1986).
- [62] W.D. Phillips, *Laser cooling and trapping of neutral atoms*, Rev. Mod. Phys. **70**, 721 (1998).
- [63] D.J. Wineland et W.M. Itano, *Laser cooling of atoms*, Phys. Rev. A **20**, 1521 (1979).
- [64] D.J. Wineland, W.M. Itano, J.C. Bergquist, et R.G. Hulet, *Laser-cooling limits and single-ion spectroscopy*, Phys. Rev. A **36**, 2220 (1987).
- [65] R.G. DeVoe, J. Hoffnagle, et R.G. Brewer, *Role of laser damping in trapped ion crystals*, Phys. Rev. A **39**, 4362 (1989).
- [66] G.C. Hegerfeldt et A.W. Vogt, *Laser cooling in ion traps - noncooling of a transverse component*, Phys. Rev. A **41**, 2610 (1990).
- [67] R. Blümel, *Cooling-induced melting of ion crystals in Paul trap*, Phys. Rev. A **51**, 620 (1995).
- [68] G. Morigi et J. Eschner, *Doppler cooling of a Coulomb crystal*, Phys. Rev. A **64**, 063407 (2001).

- [69] C. Cohen-Tannoudji, *Leçons du Collège de France : Interactions du champ électromagnétique avec des atomes* (1974).
- [70] C. Cohen-Tannoudji, *Leçons du Collège de France : Forces exercées par des photons sur des atomes* (1982).
- [71] C. Cohen-Tannoudji, *Leçons du Collège de France : Ions piégés, refroidissement radiatif et applications* (1985).
- [72] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, et G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes* (EDP Sciences, 1996).
- [73] M. Le Bellac, *Physique Quantique* (EDP Sciences, 2003).
- [74] M. Knoop, M. Vedel, et F. Vedel, *Lifetime, collisional-quenching, and j-mixing measurements of the metastable 3D levels of Ca^+* , Phys. Rev. A **52**, 3763 (1995).
- [75] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, J. Benhelm, R. Blatt, et C.F. Roos, *Precision measurement of the branching fractions of the $4p\ ^2p_{3/2}$ decay of Ca II* , Eur. Phys. J. D **50**, 13 (2008).
- [76] M.S. Safronova et U.I. Safronova, *Blackbody radiation shift, multipole polarizabilities, oscillator strengths, lifetimes, hyperfine constants, and excitation energies in Ca^+* , Phys. Rev. A **83**, 012503 (2011).
- [77] G. Grynberg, A. Aspect, et C. Fabre, *Introduction aux lasers et à l'optique quantique* (Ellipses, 1997).
- [78] J. Dalibard, *Ecole prédoctorale de Physique des Houches : Laser cooling and trapping of atomic gases* (2004).
- [79] B. Roth, A. Ostendorf, H. Wenz, et S. Schiller, *Production of large molecular ion crystals via sympathetic cooling by laser-cooled Ba^+* , J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **38**, 3673 (2005).
- [80] C.B. Zhang, D. Offenberger, B. Roth, M.A. Wilson, et S. Schiller, *Molecular-dynamics simulations of cold single-species and multispecies ion ensembles in a linear Paul trap*, Phys. Rev. A **76**, 012719 (2007).
- [81] R. Blümel, J.M. Chen, E. Peik, W. Quint, W. ans Y.R. Shen, et H. Walther, *Phase transitions of stored laser-cooled ions*, Nature **334**, 309 (1988).
- [82] J. Dalibard, Y. Castin, et K. Molmer, *Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics*, Phys. Rev. Lett. **68**, 580 (1992).
- [83] J.P. Schiffer, M. Drewsen, J.S. Hangst, et L. Hornekær, *Temperature, ordering, and equilibrium with time-dependent confining forces*, PNAS **97**, 10697 (2000).
- [84] M. G. Raizen, J.M. Gilligan, J.C. Bergquist, W.M. Itano, et D.J. Wineland, *Ionic crystals in a linear Paul trap*, Phys. Rev. A **45**, 6493 (1992).
- [85] G. Morigi et J. Eschner, *Is an ion string laser-cooled like a single ion ?*, J. Phys. B **36**, 1041 (2003).

- [86] G. Morigi et S. Fishman, *Dynamics of an ion chain in a harmonic potential*, Phys. Rev. E **70**, 066141 (2004).
- [87] G. Morigi et S. Fishman, *Eigenmodes and thermodynamics of a Coulomb chain in a harmonic potential*, Phys. Rev. Lett. **93**, 170602 (2004).
- [88] G. Morigi et S. Fishman, *One-dimensional Coulomb crystals at low temperatures*, J. Phys. B **39**, 221 (2006).
- [89] C. Wunderlich, G. Morigi, et D. Reiss, *Simultaneous cooling of axial vibrational modes in a linear ion trap*, Phys. Rev. A **72**, 023421 (2005).
- [90] S. Fishman, G. De Chiara, T. Calarco, et G. Morigi, *Structural phase transitions in low-dimensional ion crystals*, Phys. Rev. B **77**, 064111 (2008).
- [91] A. Del Campo, G. De Chiara, G. Morigi, M.B. Plenio, et A. Retzker, *Structural defects in ion chains by quenching the external potential : the inhomogeneous Kibble-Zurek mechanism*, Phys. Rev. Lett. **105**, 075701 (2010).
- [92] H. Landa, S. Marcovitch, A. Retzker, M.B. Plenio, et B. Reznik, *Quantum Coherence of Discrete Kink Solitons in Ion Traps*, Phys. Rev. Lett. **104**, 043004 (2010).
- [93] A. Dantan, M. Albert, J.P. Marler, P.F. Herskind, et M. Drewsen, *Large ion Coulomb crystals : A near-ideal medium for coupling optical cavity modes to matter*, Phys. Rev. A **80**, 041802 (2009).
- [94] I.M. Buluta, M. Kitaoka, S. Georgescu, et S. Hasegawa, *Investigation of planar Coulomb crystals for quantum simulation and computation*, Phys. Rev. A **77**, 062320 (2008).
- [95] I.M. Buluta et S. Hasegawa, *Planar Coulomb bicrystals*, Phys. Rev. A **78**, 042340 (2008).
- [96] C. Champenois, M. Marciante, J. Pedregosa-Gutierrez, M. Houssin, M. Knoop, et M. Kajita, *Ion ring in a linear multipole trap for optical frequency metrology*, Phys. Rev. A **81**, 043410 (2010).
- [97] C.W. Chou, D.B. Hume, J.C.J. Koelemeij, D.J. Wineland, et T. Rosenband, *Frequency comparison of two high-accuracy Al^+ optical clocks*, Phys. Rev. Lett. **104**, 070802 (2010).
- [98] R. Blatt et D. Wineland, *Entangled states of trapped atomic ions*, Nature **453**, 1008 (2008).
- [99] J.D. Prestage, R.L. Tjoelker, et L. Maleki, *Higher pole linear traps for atomic clock applications*, Proceedings of the 1999 Joint EFTF-IFCS, Besancon, France p. 121 (1999).
- [100] A.J. Reuben, G.B. Smith, P. Moses, A.V. Vagov, M.D. Woods, D.B. Gordon, et R.W. Munn, *Ion trajectories in exactly determined quadrupole fields*, International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes **154**, 43 (1996).
- [101] D.H.E. Dubin, *Equilibrium and dynamics of uniform density ellipsoidal non-neutral plasmas*, Physics of Fluids B **5**, 295 (1993).

- [102] M. Marciante, C. Champenois, A. Calisti, J. Pedregosa-Gutierrez, et M. Knoop, *Ion dynamics in a linear radio-frequency trap with a single cooling laser*, Phys. Rev. A **82**, 033406 (2010).
- [103] <http://www.simion.com>.
- [104] J. Pedregosa, C. Champenois, M. Houssin, et M. Knoop, *Anharmonic contributions in real rf linear quadrupole traps*, International Journal of Mass Spectrometry **290**, 100 (2010).
- [105] J. Pedregosa, C. Champenois, M. Houssin, et M. Knoop, *Erratum to “anharmonic contributions in real rf linear quadrupole traps”*, International Journal of Mass Spectrometry **293**, 57 (2010).
- [106] T. Baba et I. Waki, *Sympathetic cooling rate of gas-phase ions in a radio-frequency-quadrupole ion trap*, Appl. Phys. B **74**, 375 (2002).
- [107] M. Drewsen, I.S. Jensen, N. Kjærgaard, J. Lindballe, A. Mortensen, K. Mølhave, et D. Voigt, *Non-stationary Coulomb crystals in linear Paul traps*, J. Phys. B. **36**, 525 (2003).
- [108] M. Drewsen, A. Mortensen, J. Lindballe, K. Mølhave, et N. Kjærgaard, *Dynamically excited single-component ion Coulomb crystals in linear Paul traps*, Nucl. Instrum. and Methods A **532**, 237 (2004).

Résumé

Les pièges à ions, utilisant des champs électriques radio-fréquences (rf), offrent la possibilité de confiner des ensembles d'ions dans un domaine restreint de l'espace où, au moyen de diverses techniques de refroidissement, leur température peut être réduite jusqu'à quelques dixièmes de millikelvin. Le but du travail présenté dans cette thèse est d'étudier de façon théorique certains aspects de la dynamique des ions piégés et soumis au refroidissement laser Doppler. Dans ce but, un programme numérique utilisant la technique de la dynamique moléculaire et des méthodes de parallélisation a été développé. Dans une première partie, cette thèse introduit les connaissances nécessaires à la compréhension de la dynamique des ions en piège rf et justifie les différents modèles utilisés lors des simulations. Dans une seconde partie, une étude de l'influence de la morphologie des structures d'ions à basse température sur l'efficacité du refroidissement Doppler est présentée, dans le cas particulier des pièges quadrupolaires linéaires. Puis, une étude des propriétés des structures d'ions soumises au refroidissement Doppler dans le cas général des multipôles d'ordres supérieurs est présentée. Le dernier chapitre du manuscrit est une proposition permettant d'obtenir des régions exemptes de champ rf supplémentaires dans les multipôles linéaires d'ordre supérieurs.

Mots clefs : physique atomique, piège radio-fréquence, piège multipolaire, ions froids, cristal de Coulomb, refroidissement Doppler, simulations numériques, dynamique moléculaire, parallélisation.

Abstract

Ion traps, using radio-frequency (rf) electric fields, offer the possibility to store ion ensembles in a small region of space where, by means of cooling technics, their temperature can be reduced to some tenth of millikelvin. The aim of the work presented in this thesis is to theoretically study some aspects of the dynamics of trapped ions under Doppler laser cooling. To this aim, a numerical program using molecular dynamics technics and parallelization methods has been developed. In a first part, this thesis introduces the necessary fundamentals to understand the dynamics of ions in rf traps and justify the different models used in the simulations. In a second part, a study of the influence of the morphology of cold structures of ions on the Doppler cooling efficiency is presented, in the particular case of linear quadrupole rf traps. Then, a study of some properties of Doppler cooled ion structures in the general case of linear higher-order rf traps is presented. The last chapter of the manuscript is a proposal allowing one to obtain additional rf field-free regions in linear higher-order rf traps.

Keywords : atomic physics, radio-frequency trap, multipole trap, cold ions, Coulomb crystal, Doppler cooling, numerical simulations, molecular dynamics, parallelization.